

Métodos Numéricos Integrales para Ecuaciones de Fokker-Planck

*Memoria presentada para optar al grado de
Doctor en Ciencias Físicas por*

José Manuel Donoso Vargas

Dirigida por el profesor

Mario Soler López



* 5 3 0 9 5 4 5 2 9 6 *

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE

Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear
Facultad de Ciencias Físicas
Universidad Complutense de Madrid

noviembre 1 9 9 4

Dedicatorias y agradecimientos.

No puedo concluir la redacción de estas páginas sin mostrar mi más profundo agradecimiento a las personas que han venido acompañándome estos años, soportando de mí la obsesión en la que se convierte la realización de una tesis doctoral.

Mi especial agradecimiento al Doctor D. *Mario Soler López*, director de esta investigación, cuya capacidad de trabajo, sus conocimientos en general y su inigualable valía personal han sido en todo momento paradigma para mí y centro esencial de referencia que ha alentado la consecución de los objetivos propuestos en esta investigación. En el profesor Mario Soler no encontré sólo un director de tesis doctoral cuando llegué por primera vez a esta facultad hacia 1990. En él hallé un *maestro*, en el sentido ético, educativo y filosófico de la palabra, un profesor y, ante todo, un amigo que supo entender que mi dedicación plena a la investigación podría, esporádicamente, sentirse mermada por mi trabajo como profesor de Física. A Mario Soler le debo el haber podido consumir este trabajo, espero que mi débil aportación le sea a él -iniciador de estas líneas de investigación- tan gratificantes como lo ha sido para mí: que esta tesis sea la primera muestra de mi agradecimiento.

Especial mención merece también *Vicky*, la que hoy ya es mi mujer, por su mensaje alentador en los momentos de debilidad, por ceder parte su tiempo a este trabajo, y por sacrificar tantos momentos que no pasamos juntos para permitirme la dedicación al estudio. Nada podrá suplir todo el tiempo que perdimos de nosotros mismos, pero toda mi labor siempre la he realizado para ella... gracias a ella.

También mis padres ha sufrido esta pérdida irrecuperable del tiempo que siempre quise dedicarles, pero ellos, en especial mi madre, han sabido siempre transmitirme el valor del estudio y del conocimiento como forma de realización personal. Sé que ellos harán suyo este trabajo en la medida que les permite entender lo que para mí representa.

A pesar de que me resulta difícil cerrar la extensa relación de personas dignas de mi agradecimiento, he de mencionar por último a los componentes de este Departamento que en su día me acogieron como un miembro más, favoreciendo mi integración en el grupo: Kiko, E. Faleiro, J. J. Salgado.. investigadores de los grupos de HEGRA y DELPHI como Sergio Martínez, Dolores Fuentes, J. Contreras etc. por su apoyo, discusiones y ayuda, en especial a *Francisco Javier Sánchez*, encargado del mantenimiento del sistema informático tan esencial para esta tesis, cuya paciencia conmigo, motivada por mi falta de conocimientos informáticos, no puede pagarse sólo con esta referencia.

Índice de Contenidos

Índice de Figuras	3
I Preliminares	5
1 Introducción.	7
1.1 La ecuación de Fokker-Planck.	9
1.1.1 Ecuación Integral de Fokker-Planck.	12
1.2 Métodos de solución.	14
1.3 Objetivos.	19
Bibliografía Cap. 1	21
2 Fundamentos del Método Integral.	23
2.1 Fundamentos teóricos.	24
2.2 La función P_τ	27
2.2.1 Propiedades de P_τ	28
2.2.2 Cálculo de P_τ	30
2.3 Esquema numérico.	34
2.3.1 Discretización temporal.	34
2.3.2 Discretización espacial.	36
2.4 Tratamiento de cantidades conservadas.	39
2.4.1 Corrección sobre P_τ	40
2.4.2 Corrección de Q_{ij}^n , Autocorrelación Numérica.	42
2.5 Consistencia y estabilidad.	44
2.6 Conclusiones generales.	50
Bibliografía Cap. 2	52
3 Aplicaciones a Casos Simples .	53
3.1 Proceso de Wiener.	54
3.1.1 Proceso Wiener sobre un intervalo finito.	58
3.2 Proceso de Ornstein-Uhlenbeck.	63
3.2.1 Solución numérica.	66
3.2.2 Proceso Ornstein-Uhlenbeck con $0 < \nu < \infty$	74
3.3 Proceso de Ornstein-Uhlenbeck variable.	77

3.4	Ecuaciones de Fokker-Planck no lineales.	85
3.4.1	Proceso no markoviano con A dependiente de f	86
3.4.2	Ecuación integro-diferencial con $\langle q \rangle$ y $\langle q^2 \rangle$ constantes.	90
3.5	Operatividad del Método. Conclusiones.	99
	Bibliografía Cap. 3	102

II Aplicación a la Física del Plasma 103

4 Aplicación a la Ecuación Cinética. 105

4.1	Ecuación Cinética.	106
4.2	Probabilidad de transición para $F(v, t)$	109
4.3	Cálculo de D_{ij} y D_i	114
4.4	Esquema numérico.	116
4.4.1	Tratamiento de las magnitudes conservadas.	121
4.5	Comparación con la solución en diferencias.	126
4.6	Conclusiones.	128
	Bibliografía Cap. 4	131

5 Ecuación Cinética en Simetría Cilíndrica. 133

5.1	Cambio de variables.	134
5.2	Cálculo de los coeficientes de difusión y deriva.	140
5.3	Propagador P_r en simetría cilíndrica.	145
5.4	Esquema numérico.	152
5.4.1	Cantidades conservadas. Autocorrelación numérica.	158
5.4.2	Ejemplo preliminar.	161
5.5	Resultados.	164
	Bibliografía Cap. 5	170

Conclusiones. 171

172

A Apéndice: Tratamiento de $\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{v}, \mathbf{r}; t)$. 175

A.1	Propagador para EFP con tensor \mathcal{D} singular.	175
A.2	Extensión al caso $(2N)$ -dimensional.	178
A.3	Aplicación: movimiento browniano.	180

Índice de Figuras

3.1	<i>Proceso de Wiener en $[-1, 1]$.</i>	59
3.2	<i>Solución integral divergente en Proceso Wiener.</i>	61
3.3	<i>Proceso difusivo con D variable.</i>	64
3.4	<i>Proceso Ornstein-Uhlenbeck (I).</i>	72
3.5	<i>Proceso O-U (II). Solución numérica f_i y analítica f.</i>	73
3.6	<i>Proceso O-U en $[0, \infty[$.</i>	77
3.7	<i>Proceso con A y D variables en t (I).</i>	79
3.8	<i>Momentos de f en proceso variable (I).</i>	81
3.9	<i>Proceso con A y D dependientes de $\exp(t)$ (II).</i>	82
3.10	<i>Momentos de f en proceso variable (II).</i>	83
3.11	<i>Solución integral y exacta en proceso no markoviano con $\gamma = 0$.</i>	88
3.12	<i>Comportamiento de las colas de f en proceso con $\gamma = 0$.</i>	89
3.13	<i>Solución integral en proceso no markoviano con $\gamma = 1$.</i>	96
3.14	<i>Ecuación integro-diferencial (I) sin recalcular A y D.</i>	97
3.15	<i>Ecuación integro-diferencial (I) con efectos no lineales.</i>	97
3.16	<i>Ecuación integro-diferencial (II).</i>	98
4.1	<i>Evolución de f, A y D en las primeras iteraciones.</i>	121
4.2	<i>Evolución de f, A y D (continuación).</i>	122
4.3	<i>Energía $T(t)$. Momento $P_s = \langle v \rangle(t)$.</i>	124
4.4	<i>Aumento de la entropía $S(t_n)$.</i>	128
4.5	<i>Evolución de las colas de f. $\log[f(v, t)]$ frente a v^2.</i>	129
4.6	<i>Energía en los esquemas integral y en diferencias.</i>	130
5.1	<i>Coefficientes de difusión $D_{\alpha\beta}$ en simetría cilíndrica.</i>	143
5.2	<i>Coefficientes de deriva.</i>	144
5.3	<i>Temperaturas transversales T_{\perp} y T_{\parallel} en la aplicación previa.</i>	162
5.4	<i>Evolución de $f(v_{\perp}, v_{\parallel}; t)$. (Ejemplo preliminar).</i>	164
5.5	<i>Distribuciones marginales.</i>	165
5.6	<i>Temperaturas transversales $T_{\perp}(t)$ y $T_{\parallel}(t)$ en plasma. Termalización.</i>	168
5.7	<i>Distribución $f(v_{\perp}, v_{\parallel}; t)$. Estado de equilibrio.</i>	169
A.1	<i>Movimiento browniano.</i>	181

Parte I

Preliminares

Capítulo 1

Introducción.

El desarrollo de teorías acerca de la descripción macroscópica de sistemas físicos alejados del equilibrio termodinámico, ha propiciado la elaboración de numerosas técnicas encauzadas a la resolución de las ecuaciones que dirigen el comportamiento de dichos sistemas, que en su mayoría están gobernados por ecuaciones no lineales del tipo Fokker-Planck para la densidad de probabilidad o función de distribución. La calificación de *no linealidad* se refiere habitualmente a la dependencia, explicitada o no, del vector de convección y del tensor de difusión en las variables que caracterizan el estado macroscópico del sistema. La ecuación de Fokker-Planck configura un ortodoxo modelo de ecuación de evolución en el que se cuenta conjuntamente con la trayectoria determinista del sistema, en el vector de convección y las fluctuaciones entorno a la misma, contabilizadas en los elementos del tensor de difusión. Esta ecuación es resoluble analíticamente sólo en ciertos casos de especial simplicidad, por esta razón se han estudiado numerosos procedimientos de integración numérica, alentados por el auge creciente de la computación en nuestros días. Obviamente, entre estas técnicas se encuentran los métodos basados en diferencias finitas y elementos finitos. Sin embargo, los modelos en diferencias que pretenden representar la ecuación de original, incurren en la distorsión del significado físico de aquélla, al no ser consistentes, en general, con las propiedades conservativas de numerosos sistemas. Este inconveniente rige la evolución hacia el estado de equilibrio de modo físicamente insatisfactorio. La deficiencia señalada se ha venido subsanando con el uso repetido de esquemas explícitos en diferencias que imponen ineludiblemente el uso de pasos temporales reducidos, con el subsecuente aumento en el tiempo de computación. Por su parte, los esquemas implícitos resultan difícilmente coherentes con el mantenimiento de las cantidades conservadas y ciertas leyes de evolución propias de algunos sistemas, como el crecimiento de la entropía.

Con el fin de elaborar un modelo de resolución numérica coherente con las características físicas de cada sistema en estudio y con la pretensión de aplicarlo a la Ecuación Cinética de la Física del Plasma, nuestro grupo ha venido desarrollando a lo largo de los últimos años un método de integración inspirado en la solución analítica formal en términos de la función de Green característica de la ecuación, o solución en forma integral. La construcción de un esquema numérico basado en la ecuación integral de evolución para la densidad de probabilidad se ha venido denominando, en estudios previos, como *método numérico integral*.

El presente trabajo se ha orientado esencialmente hacia el diseño de esquemas numéricos integrales para la resolución de ecuaciones del tipo Fokker-Planck no lineales, que representan sistemas físicos para los que han de verificarse ciertas leyes de conservación. La investigación llevada a cabo en los últimos años por los componentes de nuestro grupo se sintetiza en esta tesis, cuya motivación última ha sido el perfeccionar el tratamiento de integración numérica mediante la búsqueda de funciones de Green, o funciones de *probabilidad de transición*, que conduzcan a una representación físicamente coherente con cada problema, tanto para la descripción del estado transitorio como la correspondiente al estado estacionario. Dado que la expresión de la función de Green analítica es, por lo general, desconocida para cualquier instante t , ha de procederse a determinar tal función para cortos intervalos temporales de evolución. La probabilidad de transición a tiempos cortos, también denominada *propagador* de forma más genérica, ha de ser consistente con las condiciones de contorno propias del problema general que representa. En el segundo capítulo se aporta un método sencillo para encontrar una probabilidad de transición adecuada, en la que se contabilizan los efectos de las condiciones de contorno específicas para ciertas geometrías; en el siguiente capítulo, este método se aplica a problemas simples con solución analítica conocida, representativos de numerosos sistemas físicos, comparando la solución numérica integral con la solución dada por diversos esquemas en diferencias. Se ha concedido especial énfasis al tratamiento de las magnitudes conservadas en sistemas físicos. Por esta razón se abordan ejemplos en los que se mantienen constantes dos o más momentos de la distribución. La flexibilidad en la especificación del propagador a tiempos cortos permite la adecuación iterativa de la matriz de evolución para la completa y efectiva descripción del sistema.

En los dos capítulos finales se aplica el método a la resolución numérica de la ecuación cinética de la Física del Plasma, para un plasma de un solo componente en las situaciones de geometría esférica y cilíndrica en el espacio de velocidades, suponiendo condiciones de homogeneidad espacial. En ambos casos se aportan las expresiones de los propagadores a tiempos cortos para cada geometría, exhibiendo el método de optimización de los mismos para preservar constante los valores de la energía y la cantidad de partículas del sistema. El método resulta ampliamente satisfactorio para la tasación de los tiempos de relajación característicos; el estado estacionario coincide con la distribución de equilibrio de Maxwell – Teorema H de Boltzmann – que se mantiene constante para un número ilimitado de iteraciones. Estos capítulos cierran un primer estado en la investigación de métodos numéricos eficientes, dotados de un sólido significado físico, configurando las bases para futuras aplicaciones de carácter más realista, como el cálculo de coeficientes de transporte en plasmas de fusión termonuclear con más de un componente.

El trabajo se completa con un apéndice en el que se presenta la expresión de un propagador para abordar los problemas anteriores de modo integral, cuando el sistema no muestra condiciones de homogeneidad espacial. De forma general, el apéndice se refiere a la probabilidad de transición a tiempos cortos para ecuaciones de Fokker-Planck con matriz de difusión singular (determinante nulo).

1.1 La ecuación Fokker-Planck.

En el marco de la teoría de probabilidades el estudio de los procesos estocásticos ha desempeñado un papel fundamental en la Mecánica Estadística [1], [2], [3], [4]. La presencia de numerosos fenómenos dependientes de forma extremadamente compleja del tiempo, hace prácticamente indescriptible el proceso particular. Sin embargo, ciertos valores promedio sobre el sistema, observables macroscópicamente, pueden estar regidos por leyes especialmente simples. Las consideraciones probabilísticas en física parecen plenamente justificadas cuando, a pesar del desconocimiento de las magnitudes microscópicas, siempre es posible observar regularidades en el comportamiento macrocópico del sistema. Los valores concretos de las variables microscópicas resultan irrelevantes; el sistema puede ser descrito mediante el concurso de los valores promedio de ciertas magnitudes microscópicas. Como es bien conocido en Mecánica Estadística el sistema es sustituido por una colección de subsistemas gobernados por las mismas ecuaciones de evolución, pero con diferentes microestados iniciales. Tal elección supone tratar el conjunto de las coordenadas del espacio de fases como una variable $\bar{q}(t) = q(t)$ de naturaleza puramente estocástica. La probabilidad de que q se halle dentro de un elemento de volumen dV del espacio de fases es interpretada como el número de sistemas modelo idénticos que hay dentro del intervalo. Cualquier magnitud $U(t)$ es entonces una variable estocástica, cuyo valor medio sobre la función densidad de probabilidad, función de distribución, representará una magnitud macroscópicamente observable del sistema.

El concurso del tratamiento estocástico en los fenómenos abordados habitualmente en Mecánica Estadística justifica la discreción que, en el primer capítulo de este trabajo, se presenta de modo breve con el fin de establecer la conexión entre las ecuaciones diferenciales estocásticas y las ecuaciones en la función de distribución, en especial la Ecuación de Fokker-Planck, cuya resolución numérica es el objeto último de este estudio.

La descripción completa de un sistema macroscópico habría de llevarse a cabo mediante la resolución de las ecuaciones en las N variables microscópicas características, $\{q_1(t), q_2(t), \dots, q_N(t)\} = \{q(t)\}$, en las que el comportamiento determinista se ve completado mediante el concurso de una fuerza de carácter estocástico que sintetiza en sí misma el efecto de las fluctuaciones. El conjunto de ecuaciones diferenciales estocásticas en cada variable microscópica q_i queda prescrito con el conocimiento de la fuerza fluctuante por unidad de masa $\Gamma(t)$, denominada fuerza de Langevin. Dichas ecuaciones presentan la forma

$$\frac{dq_i}{dt} \equiv \dot{q}_i(t) = a_i(q, t) + d_{ij}(q, t)\Gamma_j(t) \quad (1.1)$$

(suma sobre índices repetidos) también denominadas *ecuaciones no lineales de Langevin* si $\Gamma_j(t)$ se ajusta a una distribución gaussiana con correlación tipo δ [5] caracterizada como ruido blanco gaussiano. En otras palabras, cada Γ_j es una variable aleatoria gaussiana de media temporal nula, con función de correlación proporcional a la función δ de Dirac, según

$$\langle \Gamma_i(t) \rangle = 0, \quad \langle \Gamma_i(t)\Gamma_j(t') \rangle = 2 \delta_{ij} \delta(t-t'),$$

El término $d_{ij}(q, t)$ se conoce como ruido multiplicativo — si no es constante — y se halla directamente relacionado con las fluctuaciones en torno a la trayectoria determinista.

Sin embargo (1.1) no es la única y más generalizada forma de ecuación estocástica; existen representaciones en las que se cuenta con términos de ruido no blanco sin correlación tipo δ que suelen denominarse en la literatura como *ecuaciones generalizadas de Langevin*, véase, por ejemplo, la reciente referencia [7] y las citas aquí contenidas.

Las ecuaciones diferenciales estocásticas describen la evolución temporal de las variables estocásticas $\{q(t)\}$. Sin embargo se tiende generalmente a describir la evolución de la función densidad de probabilidad, o función de distribución $f(\mathbf{q}, t)$, de la que se desprende el número de partículas de la colectividad contenidas en un cierto volumen dV . Interesa por tanto determinar la ecuación de evolución temporal para la distribución $f(\mathbf{q}, t)$. Partiendo de la ecuación no lineal de Langevin puede obtenerse de forma unívoca la mencionada ecuación de evolución, conocida como Ecuación de Fokker-Planck, cuya expresión general es

$$\frac{\partial f}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial q_i} \left[D_i(\mathbf{q}, t) - \frac{\partial}{\partial q_j} D_{ij}(\mathbf{q}, t) \right] f(\mathbf{q}, t) \equiv L_{FP} f(\mathbf{q}, t) \quad (1.2)$$

donde L_{FP} representa al operador de la ecuación de Fokker-Planck

$$L_{FP} = - \frac{\partial}{\partial q_i} D_i(\mathbf{q}, t) + \frac{\partial^2}{\partial q_i \partial q_j} D_{ij}(\mathbf{q}, t). \quad (1.3)$$

D_i y D_{ij} son los coeficientes de convección o deriva y difusión respectivamente, obtenidos en el desarrollo en momentos de Kramers-Moyal [5]

$$D_i = D_i^{(1)} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} \langle [q_i(t + \tau) - q_i(t)] \rangle \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (1.4)$$

y

$$D_{ij} = D_{ij}^{(2)} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{2\tau} \langle [q_i(t + \tau) - q_i(t)][q_j(t + \tau) - q_j(t)] \rangle \quad (1.5)$$

siendo nulos los momentos de orden superior al segundo, es decir $D_{j_1, j_2, \dots, j_K}^{(K)} = 0$ si $K \geq 3$. Los promedios $\langle \prod_i [q_i(t + \tau) - q_i(t)] \rangle$ se calculan sobre la probabilidad de transición $P \equiv P(\mathbf{q}, t + \tau | \mathbf{q}', t)$ o *probabilidad condicional* para la probabilidad de que la variable aleatoria $q(t)$ pase de tomar el valor \mathbf{q}' , en el instante t , al valor $\mathbf{q}(t + \tau) = \mathbf{q}$ en el instante $t + \tau$, esto es

$$\langle \prod_i [q_i(t + \tau) - q_i(t)] \rangle = \int \prod_i (q_i - q'_i) P(\mathbf{q}, t + \tau | \mathbf{q}', t) d^N q .$$

Dado que la probabilidad de transición P es un caso especial de densidad de probabilidad, con la condición inicial $P(\mathbf{q}, t | \mathbf{q}', t) = \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$, esta función habrá de satisfacer (1.2) cuando $f(\mathbf{q}, t)$ es sustituida por $P(\mathbf{q}, t | \mathbf{q}', t')$.

La relación entre las funciones a_i y d_{ij} del sistema de ecuaciones diferenciales estocásticas (1.1) y los correspondientes coeficientes de la ecuación evolución para $f(\mathbf{q}, t)$ se establece de forma unívoca según

$$\left\{ \begin{array}{l} D_i(\mathbf{q}, t) = a_i(\mathbf{q}, t) + d_{kj}(\mathbf{q}, t) \partial d_{ij}(\mathbf{q}, t) / \partial q_k \\ D_{ij}(\mathbf{q}, t) = d_{ik}(\mathbf{q}, t) d_{jk}(\mathbf{q}, t), \\ D_{j_1, \dots, j_K}^{(K)} = 0, \text{ si } K \geq 3, \end{array} \right. \quad (1.6)$$

en sentido de Stratonovich [5]. La presencia de las funciones d_{ij} dependientes de las variables $\{q\}$ añade a los coeficientes de convección deterministas a_i ; el término espúreo $\bar{d}_{kj}\partial d_{ij}/\partial q_k$, ello muestra cómo la existencia de las fluctuaciones afecta no sólo a los fenómenos difusivos, sino que también condiciona los efectos de deriva. Las ecuaciones de Langevin, sin embargo, no quedan establecidas unívocamente con el conocimiento de los coeficientes de la ecuación diferencial de Fokker-Planck, si $N \geq 2$, a menos que se impongan condiciones adicionales sobre los mismos. Resulta evidente que la descripción del sistema en las variables microscópicas es improcedente si, como es habitual en Física Estadística, sólo se dispone de la ecuación de evolución para la distribución en la forma (1.2). No obstante, es interesante notar a partir de las ecuaciones de Langevin, que toda ecuación de Fokker-Planck muestra el efecto de las fluctuaciones en las variables macroscópicas en torno a la trayectoria determinista regida por los coeficientes de convección. Este hecho contribuye a un mejor entendimiento de las expresiones que a lo largo de la exposición se muestran para aproximar la probabilidad de transición a cortos intervalos temporales de evolución, lo que justifica la referencia a las ecuaciones estocásticas en esta sección.

Así pues, en lugar de describir el sistema mediante el conjunto de ecuaciones de Langevin no lineales para la evolución microscópica, es habitual recurrir a la representación macroscópica contenida explícitamente en la ecuación de movimiento para $f(q, t)$ en (1.2) sobre el conjunto de variables macroscópicas q que fluctúan de modo estocástico. El tratamiento puramente determinista viene prescrito por la ecuación de Fokker-Planck en la que se consideren nulos los elementos del tensor de difusión: el sistema de ecuaciones diferenciales para las N macrovariables se reduce entonces a las relaciones $\dot{q}_i = D_i(q, t)$, es decir, si se prescinde del efecto de las fluctuaciones, el sistema queda descrito únicamente con el conocimiento de los elementos del vector de convección.

La Ecuación de Fokker-Planck representa, por tanto, la ley de evolución para la función de distribución de las variables macroscópicas, asociada a la ecuación diferencial estocástica (1.1) para las variables microscópicas. El objeto de este trabajo es proponer un método de integración numérica para las ecuaciones de la Física Estadística análogas a (1.2). En particular, la investigación se centra en el estudio sobre la Ecuación de Fokker-Planck que surge en la Física del Plasma, en la que los coeficientes de difusión y deriva son funciones integrales de la propia distribución f , de ahí la denominación *ecuación integral*, o *ecuación no lineal*, de Fokker-Planck que a menudo se utiliza en la exposición. A pesar del carácter no markoviano de los procesos representados por la ecuación integral, así como del desconocimiento del conjunto de ecuaciones generalizadas de Langevin para la descripción de dichos sistemas, el paralelismo con los procesos de Markov y los métodos de resolución para ecuaciones ordinarias de Fokker-Planck se ha trazado de tal modo que ha sido posible perfilar un robusto esquema explícito de integración numérica apto para toda ecuación formalmente identificable con (1.2). El método propuesto se inspira fundamentalmente en consideraciones teóricas acerca de las ecuaciones de evolución en forma integral para la función de distribución de fenómenos ligados a procesos de naturaleza probabilística; las relaciones (1.6) pueden servir como base para la construcción de un propagador a tiempos cortos P_τ válido para implementar f .

1.1.1 Ecuación Integral de Fokker-Planck.

Partiendo de la ecuación fundamental de la Mecánica Estadística, o Ecuación de Liouville, es posible derivar una gama de ecuaciones cinéticas atendiendo a las posibles simplificaciones y aproximaciones que puedan considerarse en cada proceso particular. De este modo surge la ecuación de Fokker-Planck en la Física Estadística como una ecuación de evolución integro-diferencial para la función de distribución, al igual que la ecuación de Boltzmann. Resulta habitual deducir la ecuación cinética de Fokker-Planck a partir de la ecuación de Boltzmann, desarrollando ésta en momentos para los incrementos de la velocidad y truncado el desarrollo en el segundo término. Un tratamiento exhaustivo de los problemas implícitos en la derivación de la ecuación integral de Fokker-Planck no es materia de estudio en esta tesis, cuyo objetivo, como se ha indicado, es la construcción de nuevos métodos numéricos de resolución para la misma. Sólo se reseñan aquí las propiedades físicas esenciales que caracterizan dicha ecuación, a las que se atiende especialmente a lo largo del trabajo, en tanto que éstas contribuyen a caracterizar aquellas soluciones físicamente consistentes con el problema. El lector puede remitirse a las referencias [2] y [8] en las que se discuten aspectos de las ecuaciones citadas anteriormente.

La ecuación cinética de Fokker-Planck se presenta formalmente según (1.2), donde el vector de convección y el tensor de difusión son funciones integrales de la propia función de distribución en el espacio de posiciones y velocidades, el término colisional de ésta se reduce al término colisional de Landau, que puede representarse como la divergencia de una corriente \mathbf{J} . Siguiendo el formalismo de partículas testigo tipo α afectadas por colisiones binarias en un medio de partículas tipo β , bajo la perspectiva de una interacción puramente coulombiana, en un plasma totalmente ionizado compuesto por las dos especies α y β , Trubnikov deriva la ecuación cinética de la Física del Plasma, que para la distribución del componente α normalizada a la densidad espacial de partículas se expresa según

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + v_i \frac{\partial f_\alpha}{\partial x_i} - \frac{F_i}{m} \frac{\partial f_\alpha}{\partial v_i} = \\ - \frac{\partial}{\partial v_i} \left[D_i^\alpha(f_\alpha, f_\beta) - \frac{\partial}{\partial v_j} D_{ij}^\alpha(f_\alpha, f_\beta) \right] f_\alpha(\mathbf{v}, t; \mathbf{r}) = - \frac{\partial J_i}{\partial v_i} \end{aligned} \quad (1.7)$$

donde \mathbf{F} representa una fuerza derivada de un potencial medio de interacción $U(\mathbf{r}|f)$ responsable de los procesos colectivos cuando las escalas temporales de los mismos son del orden de las escalas temporales que gobiernan los procesos de colisiones binarias. El sumando donde se incluye \mathbf{F} suele denominarse habitualmente como *término de campo medio*. La notación $D(f_\alpha, f_\beta)$ alude a la dependencia en la propia función de distribución de los llamados coeficientes difusivos, siguiendo la denominación de Spitzer [9], relacionados directamente con los incrementos colisionales medios de la velocidad $\langle \Delta v_i \rangle^{\alpha/\beta} = D_i^{\alpha/\beta}$ y $\langle \Delta v_i \Delta v_j \rangle^{\alpha/\beta} = 2 D_{ij}^{\alpha/\beta}$ como

$$\begin{aligned} D_i^\alpha &= D_i^{\alpha/\alpha} + D_i^{\alpha/\beta} \\ D_{ij}^\alpha &= D_{ij}^{\alpha/\alpha} + D_{ij}^{\alpha/\beta}, \end{aligned}$$

que suelen expresarse en términos de los Potenciales de Rosenbluth, [10],

$$\psi_\beta = -\frac{1}{8\pi} \int |\mathbf{v} - \mathbf{v}'| f_\beta(\mathbf{v}', t) d\mathbf{v}' \quad \text{y} \quad \varphi_\beta = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{1}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|} f_\beta(\mathbf{v}', t) d\mathbf{v}' \quad (1.8)$$

con arreglo a las relaciones

$$D_{ij}^{\alpha/\beta} = -L^{\alpha/\beta} \frac{\partial^2 \psi_\beta}{\partial v_i \partial v_j} = D_{ji}^{\alpha/\beta} \quad (1.9)$$

y

$$D_i^{\alpha/\beta} = -\left(1 + \frac{m_\alpha}{m_\beta}\right) L^{\alpha/\beta} \frac{\partial \varphi_\beta}{\partial v_i} = \left(1 + \frac{m_\alpha}{m_\beta}\right) \frac{\partial D_{ik}^{\alpha/\beta}}{\partial v_k} \quad (1.10)$$

donde $L^{\alpha/\beta}$ es un parámetro dependiente del Logaritmo de Coulomb $\lambda^{\alpha/\beta}$ según $L^{\alpha/\beta} = \lambda^{\alpha/\beta} (4\pi e_\alpha e_\beta / m_\alpha)^2$ en unidades c.g.s. —e y m simbolizan la carga y la masa de cada especie —.

A la vista de las relaciones (1.9) y (1.10) es posible inferir las tasas de variación de momento y energía por unidad de tiempo transferidas por cada partícula de la especie α de la colectividad, debidas a la interacción con el medio de partículas β :

$$\frac{d\mathbf{p}_\alpha}{dt} = m_\alpha \langle \Delta \mathbf{v} \rangle^{\alpha/\beta} = -m_\alpha \mathbf{D}^{\alpha/\beta} \quad (1.11)$$

$$\frac{d\varepsilon_\alpha}{dt} = \frac{m_\alpha}{2} \frac{d}{dt} \overline{v_i v_i} = m_\alpha (D_{kk}^{\alpha/\beta} + v_k D_k^{\alpha/\beta})$$

verificándose las leyes de conservación para el momento y la energía totales

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \frac{d}{dt} (\mathbf{p}_\alpha + \mathbf{p}_\beta) = \int \dot{\mathbf{p}}_\alpha f_\alpha d\mathbf{v} + \int \dot{\mathbf{p}}_\beta f_\beta d\mathbf{v} = 0 \quad (1.12)$$

$$\frac{dE}{dt} = \frac{d}{dt} (\varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta) = \int \dot{\varepsilon}_\alpha f_\alpha d\mathbf{v} + \int \dot{\varepsilon}_\beta f_\beta d\mathbf{v} = 0$$

en ausencia de fuerzas exteriores. En particular, para un plasma de un solo componente el operador L_{FP} correspondiente a la ecuación (1.7) induce a la conservación del número de partículas, momento lineal y la energía del sistema. Por otra parte, la ecuación integral de Fokker-Planck verifica las condiciones del Teorema H de Boltzmann, por lo que presenta como solución estacionaria la correspondiente al equilibrio maxwelliano, lo que la califica como una ecuación irreversible no lineal. La evolución del sistema ha de ser consistente con el aumento continuo de la entropía hasta alcanzar la distribución maxwelliana que maximiza dicha función y anula la corriente \mathbf{J} en el equilibrio. En los capítulos finales se analizan las soluciones de (1.7) en condiciones de homogeneidad espacial y en ausencia del término de campo medio, asumiendo pues, que la escala temporal de los procesos colectivos es mucho menor que la que dirige los procesos colisionales binarios. Bajo estas condiciones, el método numérico integral ha de dar respuesta a las propiedades conservativas implícitas

en el operador colisional, así como mostrar una evolución temporal acorde con el principio de crecimiento de la entropía y la tendencia hacia la solución única en el equilibrio.

Es interesante notar que los coeficientes difusivos de la ecuación cinética de la Física del Plasma evolucionan lentamente en el tiempo, bajo ciertas condiciones, por lo que en las proximidades del equilibrio maxwelliano dichos coeficientes pueden sustituirse por los correspondientes a la solución estacionaria de equilibrio, lo que transforma a (1.7) en una ecuación lineal u ordinaria de Fokker-Planck, en la que D_i y D_{ij} son funciones conocidas de v . El proceso responde a una linealización en la que el sistema físico original es entendido de forma radicalmente distinta a la implícita en la ecuación original. En este caso, se supone que durante la evolución del sistema las partículas de la colectividad no interactúan entre ellas haciéndolo, en cambio, con un fondo de partículas en estado de equilibrio termodinámico. La ecuación lineal en derivadas parciales, parabólica de segundo orden encaja así en el modelo de ecuaciones de Fokker-Planck que representan procesos estocásticos de Markov. La eliminación del carácter no lineal desvirtúa notablemente el sentido físico del operador colisional de Landau. No obstante, este tratamiento propicia el estudio de la ecuación integral en el marco de la aproximación mediante esquemas numéricos integrales trazado en esta tesis. Por esta razón se han analizado algunos problemas relativos a las ecuaciones lineales para extender el método a procesos en los que los coeficientes difusivos dependen directamente de la propia densidad de probabilidad. Los excelentes resultados para problemas no lineales (capítulo tercero) con soluciones analíticas conocidas son parejos a los encontrados para las ecuaciones lineales en los que D_i y D_{ij} dependen de una forma conocida de las variables q y del tiempo. El esquema numérico integral es totalmente explícito: la dependencia funcional de los coeficientes es en último extremo una dependencia en las variables independientes, formalmente conocida en cada iteración, lo que induce a la aceptación del nuevo esquema numérico como apto para representar soluciones de las ecuaciones no lineales.

1.2 Métodos de solución.

La ecuación de Fokker-Planck relativa a los procesos estocásticos de Markov se ha venido configurando en los últimos años como una poderosa herramienta para la descripción de fenómenos caracterizados por cambios cualitativos macroscópicos de ciertos sistemas físicos. Bajo esta perspectiva se han trazado numerosos métodos de resolución para la descripción de tales sistemas en los estados transitorio y estacionario. Dado que el procedimiento desarrollado en este trabajo (capítulo 2) para determinar una probabilidad de transición a tiempos cortos apta para implementar f en la ecuación no lineal, se reduce a la resolución de una ecuación ordinaria de Fokker-Planck, se ha estimado conveniente referenciar aquí algunos de los métodos utilizados para hallar tales soluciones.

La posibilidad de encontrar soluciones analíticas se reduce a casos de especial simplicidad en la dependencia funcional de los coeficientes D_i y D_{ij} . En ocasiones, si estos coeficientes son independientes del tiempo,¹ es posible derivar la solución estacionaria que, para el caso

¹También si se tornan independientes del tiempo cuando éste tiende a infinito.

de una variable en condiciones de corriente nula sobre las fronteras, se suele escribir como

$$f_{est}(q) = N \exp[-\phi(q)] \text{ con } \phi(q) = \ln D_{qq}(q) - \int_q \frac{D_q(u)}{D_{qq}(u)} du, \quad (1.13)$$

donde $\phi(q)$ recibe el nombre de *potencial de la ecuación de Fokker-Planck*, N es la constante de normalización. La extensión a más de una variable es especialmente simple cuando se verifican las condiciones de *balance detallado* relativas a los coeficientes difusivos [5], [6]; la solución estacionaria, y por tanto $\phi(\{q\})$, se obtienen a través de una integral de línea. Son numerosos los problemas en los que se puede calcular la solución analítica estacionaria para cualesquiera condiciones sobre la corriente \mathbf{J} . Una interesante síntesis de los procedimientos a seguir para tal fin puede encontrarse en la referencia [6] en la que el autor expone una amplia gama de las condiciones de frontera más representativas bajo las que es habitual resolver la ecuación diferencial. En condiciones de corriente nula sobre los puntos (o superficies, para más de una dimensión) donde los coeficientes difusivos presentan singularidades, la existencia del potencial ϕ favorece la reducción de la ecuación original a una ecuación tipo Schrödinger. Las condiciones de corriente nula y el conocimiento del potencial ϕ permiten inferir la solución para la probabilidad de transición $P(\mathbf{q}, t | \mathbf{q}', t')$ como un desarrollo en autofunciones y autovalores $\{\rho_\lambda(\mathbf{q})\}$ del operador $L_{FP}(\mathbf{q})$. Cuando P se factoriza en la forma $P = \rho(\mathbf{q}) \exp(-\lambda t)$, la ecuación satisfecha por ρ se reduce a $L_{FP}\rho = -\lambda\rho$. Una vez determinadas la autofunciones y los autovalores sujetos a las condiciones de contorno del problema y a la condición inicial $P(\mathbf{q}, t | \mathbf{q}', t) = \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$, P se determina por la solución formal

$$P(\mathbf{q}, t | \mathbf{q}', t') = e^{(t-t')L_{FP}} \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$$

para dar la expresión del propagador

$$P(\mathbf{q}, t | \mathbf{q}', t') = e^{\phi(\mathbf{q}')} \sum_{\lambda} \rho_{\lambda}(\mathbf{q}) \rho_{\lambda}(\mathbf{q}') e^{-\lambda(t-t')}, \quad t \geq t', \quad (1.14)$$

siendo la densidad de probabilidad $f(\mathbf{q}, t)$

$$f(\mathbf{q}, t) = \int_{\mathbf{q}'} f(\mathbf{q}', t') P(\mathbf{q}, t | \mathbf{q}', t') d^N \mathbf{q}' , \quad t \geq t' \geq 0, \quad (1.15)$$

como se desprende de la definición de P . La ecuación (1.15) es equivalente a la ecuación diferencial de Fokker-Planck para describir el movimiento de f y se conoce habitualmente como *ecuación integral de evolución*.

Para ecuaciones no lineales de Fokker-Planck, o más generalmente, para ecuaciones diferenciales de naturaleza estocástica en las macrovariables del sistema, la ecuación integral de evolución sirve como base para avanzar f en el tiempo, si se conoce la expresión apropiada del propagador P . Tal propagador se entiende como una función de Green sin el significado particular de probabilidad de transición. Este esquema de avance vertebra los procedimientos de integración numérica que se describen en los capítulos siguientes. La forma especial del operador L_{FP} permite inferir $P(\mathbf{q}, t + \tau | \mathbf{q}, t) = P_{\tau}$ para $\tau \rightarrow 0$. Ya que P_{τ} satisface la relación formal

$$P_{\tau} = [1 + \tau L_{FP} + O(\tau^2)] \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \simeq e^{\tau L_{FP}} \delta, \quad (1.16)$$

si la función δ se escribe en la representación de Fourier ([5], [6]) P_τ adquiere, para el caso de una variable, la expresión

$$P_\tau = \frac{1}{4\pi D_{qq}(q', t)} \exp \left[-\frac{[q - q' - D_q(q', t)\tau]^2}{4D_{qq}(q', t)\tau} \right]$$

que corresponde a una distribución gaussiana de media $\bar{q} = q' + D_q\tau$ y desviación σ^2 proporcional a $D_{qq}\tau$. Resulta evidente que para cortos intervalos de evolución, $\tau = t - t' > 0$, el proceso descrito por una ecuación del tipo Fokker-Planck puede entenderse como un proceso en el que las variables estocásticas fluctúan en torno a la trayectoria determinista $q = q' + \tau D_q$ siguiendo un modelo difusivo, cuyo alcance se computa aproximadamente con $D_{qq}(q', t)$ si τ es reducido. Las mismas conclusiones se extraen al resolver el conjunto de ecuaciones estocásticas (1.1) para $\tau \rightarrow 0$. La distribución f experimenta las consecuencias de una deriva de valor $\tau D_q(q', t)$ y de un proceso difusivo simultáneo regido por la desviación proporcional a D_{qq} . A pesar de que la expresión de P_τ no es única, como se verá en el siguiente capítulo, es válida para representar el proceso de evolución sufrido por f durante un intervalo temporal τ pequeño. Este hecho sirve como base para dar una solución a la ecuación original aplicando la ecuación integral de evolución para $f(q, t_n + \tau)$ iterativamente. Para ello, el intervalo $(0, t)$ se divide en M subintervalos de anchura $\tau = t/M$, por lo que

$$f(q, t) = \int dq_{M-1} \cdots \int dq_0 P_\tau(q, q_{M-1}; \tau) \cdots P_\tau(q_1, q_0; \tau) f(q_0, 0). \quad (1.17)$$

La expresión analítica de f se obtendría de (1.17), tras proceder al límite $M \rightarrow \infty$ y $\tau \rightarrow 0$ con $M\tau = t$. Tal solución se conoce suficientemente en la literatura (Path Integral Solution) pero los casos en los que resulta aplicable son escasos y el modo de resolver la integración no es claro para problemas en más de una variable, fijadas las condiciones de contorno específicas. No obstante, el esquema de avance integral puede resultar tan válido como un esquema de avance en diferencias para implementar f numéricamente, si se conoce la forma de P_τ adecuada a cada problema. Bajo este enfoque se ha desarrollado esta tesis: el esquema integral de evolución se traduce en una herramienta básica para el avance temporal de la función de distribución, como lo es cualquier representación en diferencias del problema continuo.

La ecuación integral de avance temporal para la distribución f se presenta como una alternativa eficiente a los esquemas de integración numérica basados en diferencias o elementos finitos. El problema de evaluar el propagador P_τ se ha solventado mediante el procedimiento de reducción de la ecuación formal (1.16) a una ecuación ordinaria de Fokker-Planck cuya solución sea conocida o pueda determinarse por los métodos desarrollados en la literatura al efecto. En particular, se ha tendido a representar la función δ de Dirac como un desarrollo en autofunciones que cumplan las condiciones del problema original, lo que favorece la representación de P_τ en la forma de (1.14). Uno de los objetivos básicos de este trabajo y de las investigaciones realizadas por nuestro grupo, se centra en la elección de propagadores P_τ que satisfagan ciertas propiedades encaminadas a optimizar cualquier proceso de integración numérica y que resulten aptos para un esquema de avance temporal con un valor finito de τ . Especial interés reviste, bajo la perspectiva anunciada, el método de resolución analítico basado en el cambio de variables. Cuando la dependencia funcional

de los coeficientes difusivos así lo exija es posible construir una ecuación auxiliar de Fokker-Planck cuyo propagador será apto para el problema en cuestión si τ es pequeño. Partiendo de una ecuación sencilla con solución analítica conocida, el procedimiento del cambio de variables ofrece una nueva ecuación de Fokker-Planck en la que la dependencia funcional de los coeficientes difusivos en las nuevas variables puede ser útil para evaluar la expresión de un propagador apto para la ecuación cuya solución se pretende aproximar sobre cortos intervalos de evolución. Tal procedimiento es habitual en el trazado de ecuaciones con soluciones conocidas para la verificación de otros métodos de integración. Como ejemplo basta contemplar el desarrollo efectuado por los autores de la referencia [11] en la que se ofrece toda una gama de ecuaciones de Fokker-Planck ordinarias obtenidas por cambios de variable en un proceso con matriz de difusión constante y vector de convección lineal en $\{q\}$ (proceso de Ornstein-Uhlenbeck). Si en lugar de las N variables $\{q\}$ se utilizan las N nuevas variables $\{p\}$, dadas por las relaciones

$$p_i = p_i(\{q\}, t); \quad i = 1, \dots, N$$

la nueva distribución $f(p, t) = f^*$ se expresa en función de $f(q, t)$ como $f^* = J f$, donde J representa el jacobiano de la transformación $J = |Det \{\partial q_i / \partial p_j\}|$. La función f^* satisface así la ecuación (1.2) en las variables $\{p\}$, con los coeficientes D_k^* y D_{kl}^* dados por

$$D_k^* = \left(\frac{\partial p_k}{\partial t} \right)_q + \frac{\partial p_k}{\partial q_i} D_i + \frac{\partial^2 p_k}{\partial q_i \partial q_j} D_{ij} \quad \text{y} \quad D_{kl}^* = \frac{\partial p_k}{\partial q_i} D_{ij} \frac{\partial p_l}{\partial q_j}, \quad (1.18)$$

la notación $(\cdot)_q$ indica que la derivación en el paréntesis se efectúa manteniendo las antiguas variables constantes.

El método de resolución basado en el formalismo de propagadores o funciones de Green ha sido ya utilizado por otros autores en un desarrollo paralelo al efectuado por nuestro grupo ([12], [14], [15]...) en los últimos años. Merecen reseñarse los recientes trabajos de W. N. G. Hitchon ([17], [18] y [19]) sobre esquemas de integración numéricos acelerados para ecuaciones de Boltzmann o ecuaciones generales (Master Equations) de naturaleza probabilística, inspirados en la construcción de propagadores mediante argumentos físicos tomados del significado propio de la ecuación en forma diferencial. En las referencias citadas se contempla el interés que recientemente ha suscitado la aplicación de tales modelos numéricos en diversos campos de la Física. Sin embargo, todas las aproximaciones numéricas que se han desarrollado bajo esta perspectiva están referidas a las ecuaciones que se han venido denominando *lineales*, representativas de procesos de Markov. La trayectoria seguida en nuestras investigaciones se ha dirigido hacia la forma de extender el formalismo de los propagadores a ecuaciones no lineales, en particular para la ecuación integral de Fokker-Planck (1.7) con más de una magnitud conservada. Estas ecuaciones proceden de ecuaciones generalizadas de Langevin no lineales en las que, probablemente, se cuentan con procesos inducidos de memoria² en la representación estocástica de las microvariables. En general, no se conocen las ecuaciones diferenciales estocásticas de las que se desprenden las ecuaciones no lineales en la densidad de probabilidad. Tal extensión tiene como origen la aplicación del método a problemas lineales con coeficientes difusivos dependientes del tiempo, para desembocar

² véase por ejemplo la referencia [13] que se cita en el tercer capítulo

definitivamente en el tratamiento de ecuaciones con coeficientes dependientes de la propia distribución. Las aplicaciones mostradas en el tercer capítulo del trabajo muestran cómo la generalización del método numérico integral resulta igualmente satisfactorio para la resolución de problemas no lineales.

La exposición anterior ha centrado el tema en los procedimientos numéricos para la búsqueda de soluciones a la ecuación de Fokker-Planck no lineal. Es obvio que los métodos basados en diferencias finitas han sido estudiados suficientemente en la literatura, sin embargo, son numerosos los problemas que la aplicación de tales métodos induce para la obtención de soluciones con verdadero sentido físico. La dificultad de mantener más de una cantidad conservada (norma, momento lineal y energía del sistema) en la ecuación discretizada, ocasiona la descripción incorrecta del estado estacionario y probablemente, del régimen transitorio. La dificultad parece solventarse mediante la construcción de esquemas explícitos que imponen un paso temporal τ excesivamente reducido, con el consiguiente alargamiento del tiempo de computación. Incluso para estos métodos la no violación del crecimiento de la entropía, $S \propto - \int f \ln f d^3v$, resulta imposible si no se fija adecuadamente τ . No obstante, se han desarrollado esquemas explícitos conservativos que ofrecen una evolución físicamente aceptable de la entropía del sistema, por ejemplo el propuesto en [21] en el año 1987, donde la responsabilidad de las magnitudes conservadas se delega en los puntos extremos de la red; la ecuación resuelta por el autor coincide con la ecuación integral de la Física del Plasma para un plasma isotrópico (cuarto capítulo). Es interesante la referencia de los autores a esquemas numéricos no conservativos en los que el no crecimiento de la entropía incurre en soluciones de equilibrio diferentes a las del equilibrio maxwelliano. Un amplio repaso de los esquemas desarrollados hasta 1992 se expone en el extenso artículo [22] donde, además se ofrecen propuestas para mejorar los procedimientos numéricos en diferencias para ecuaciones de difusión en la Teoría Cinética de gases.

La rigurosa elección del reducido paso temporal en los esquemas en diferencias explícitos que pretenden conservar dos cantidades físicas, no sólo se traduce en un mayor tiempo de computación sino que, además, como muestran los autores de la reciente referencia [23], el carácter no lineal de la ecuación integral puede incurrir en soluciones numéricas espúreas para el estado estacionario tras gran número de iteraciones. En este artículo se ofrecen ejemplos simples de ecuaciones difusivas no lineales, resueltas por los procedimientos habituales en diferencias, incluso para esquemas implícitos, con soluciones analíticas conocidas para los que se obtienen soluciones erróneas que, sin embargo, resultan estables numéricamente.

Los esquemas implícitos ofrecen la ventaja de permitir un paso temporal mayor y reducir el tiempo de computación, mas la imposibilidad práctica de encauzar el esquema hacia la conservación de al menos dos cantidades físicas es patente, debido al proceso de inversión matricial necesario para implementar la distribución. Es interesante el artículo [24] aparecido en el momento de redactar estas líneas, en el que el autor desarrolla un esquema en diferencias implícito y conservativo para la ecuación integral en simetría esférica (tratada en el capítulo 4). Sin embargo, la conservación de la energía se consigue mediante linealización del operador colisional, tras forzar la positividad de f mediante un habitual esquema de Chang-Cooper, que desplaza, mediante pesos estadísticos apropiados, el valor de f_i sobre cada intervalo espacial discreto no uniforme Δv_i . El resultado es un esquema complicado, sin claro significado físico y sin eludir la linealización del operador \mathbf{L}_{FP} .

A las dificultades presentadas en párrafos anteriores, vienen a sumarse las derivadas de la

1.3. Objetivos.

aplicación de esquemas en diferencias a problemas de más de una dimensión, para los cuales el ejercicio de la inversión matricial obliga al uso de aproximaciones basadas en el método de las direcciones alternadas, que pueden ocasionar una pérdida de información sobre las características del sistema y la consiguiente devaluación de las ya deficientes propiedades conservativas del operador discretizado.

Respecto a métodos en elementos finitos cabe señalar, citando a Charles F. F. Karney ([25], [26] y [27]³), que la aportación de los mismos es equiparable a la concedida por los métodos en diferencias para la ecuación integral de Fokker-Planck, no proporcionando una mejora sustancial a los problemas suscitados por los métodos habituales.

Por su parte, las soluciones analíticas dadas en la literatura para resolver las ecuaciones cinéticas y calcular los coeficientes de transporte, tales como los tratamientos de Hilbert [28], de Enskog y Chapman [29] y Braginskii [30], se inspiran en desarrollos perturbativos y linealizaciones del operador colisional que distorsionan la propia naturaleza alineal del problema. En todos estos los métodos analíticos, el recurso de la computación se presenta, en la práctica, como ineludible para el cálculo, salvo en los órdenes más bajos de la aproximación. Ante esta necesidad, parece razonable proponer nuevos esquemas numéricos para resolver problemas no lineales, sin recurrir a aproximaciones innecesarias que pueden no representar fielmente un sistema físico como el descrito por la ecuación integral de Fokker-Planck. De hecho, actualmente se aprecia la tendencia a eliminar los métodos de cálculo analíticos en favor de la construcción de esquemas numéricos efectivos, como lo reflejan las referencias citadas anteriormente. Ante esta paronámica se ha desarrollado el esquema numérico integral objeto de este trabajo, cuyos fundamentos básicos se presentan a continuación.

1.3 Objetivos.

Es evidente, en virtud de lo expuesto, que el objetivo básico de esta tesis es el configurar nuevos esquemas de integración numérica para ecuaciones de Fokker-Planck no lineales en los que se desechen por completo todo tipo de linealizaciones y aproximaciones previas. Así se fundamentarán las bases para la aplicabilidad del método integral a situaciones con verdadero significado físico, cuyo alcance escapa de las pretensiones de este trabajo, tales como el cálculo de coeficientes de transporte en plasmas termonucleares con más de un componente.

El método ha de dar respuesta a los problemas planteados por la aplicación de los métodos numéricos habituales, como la conservación de más de una magnitud física. Con esta finalidad se ha desarrollado el procedimiento de integración numérica basado en la ecuación integral de evolución, dotada de un claro significado físico propiciado por el formalismo de propagadores o probabilidades de transición. Las primeras investigaciones consumadas por nuestro grupo se sintetizan y mejoran en este trabajo.

Dos son los objetivos intermedios trazados para la expresión matemática definitiva del método integral: en primer lugar es preciso aportar un modelo eficiente para la obtención de propagadores a tiempos cortos que aproximen fielmente al propagador verdadero cuya expresión desconoce; en segundo lugar, es necesario extender el tratamiento numérico

³pág. 27

para ecuaciones ordinarias de Fokker-Planck a las llamadas ecuaciones no lineales, formalmente análogas a las primeras, en las que los coeficientes difusivos dependen de la propia función de distribución. El primer objetivo se ve cumplido de forma satisfactoria mediante el procedimiento de derivar la probabilidad de transición P_T recurriendo a un problema auxiliar de ecuación de Fokker-Planck con las mismas condiciones de contorno implícitas en el problema original. La flexibilidad del cálculo permite establecer correcciones tendientes a respetar la constancia de ciertas magnitudes conservadas. Este método se da en el segundo capítulo del trabajo y se aplica de modo satisfactorio en el capítulo siguiente. La extensión a ecuaciones integro-diferenciales, o no lineales de Fokker-Planck en general, se aborda definitivamente entendiéndose que el carácter explícito del método numérico concede numéricamente el conocimiento formal de los coeficientes difusivos, a efectos prácticos, dependientes en último extremo de las variables espaciales y del tiempo. El tercer capítulo ilustra el procedimiento a seguir para casos generales y sienta los precedentes fundamentales para las aplicaciones posteriores. Por razones pedagógicas el método se presenta a través de aplicaciones simples, que van desde procesos con difusión constante a casos no lineales en los que es posible comparar las soluciones numéricas con las analíticas. Las pautas generales para la operatividad del método se extraen consecuentemente de estas aplicaciones.

La aplicación a la ecuación integral de Fokker-Planck para plasmas de un solo componente en condiciones de isotropía total (cuarto capítulo), y en coordenadas cilíndricas en el espacio de velocidades (quinto capítulo), refrendan la validez del método para representar de forma físicamente coherente el problema. Los propagadores derivados para ambos casos dan solución no sólo a la descripción del estado transitorio del sistema, conservando las magnitudes físicas, sino que también son aptos para la descripción del estado estacionario de equilibrio sin limitación en el número de iteraciones. En ambos capítulos se consuman de forma definitiva los objetivos propuestos en este trabajo y se constata la eficiencia del modelo numérico, lo que deja abierta la posibilidad para realizar aplicaciones posteriores a problemas con mayor interés físico.

Bibliografía

- [1] N.G. Van Kampen: *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, 4rd reprint (North-Holland, Amsterdam, New York, Oxford 1985).
- [2] S. Chapman and T.G. Cowling: *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gasses*, 3rd. ed., (Cambridge University Press, Cambridge, 1970).
- [3] R. Balescu: *Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics* (Wiley, New York 1975).
- [4] Lax M., *Rev. Mod. Phys.* 32,25(1960) (a),38, 359(1966)(b) y 38,541(1966) (c).
- [5] H. Risken: *The Fokker-Planck Equation*, 2nd. ed., Springer Ser. Synergetics, Vol. 18 (Springer, Berlin, Heidelberg, New York) 1989
- [6] C. W. Gardiner: *Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry and Natural Sciences*, Springer Ser. Synergetics, Vol. 13 (Springer, Berlin, Heidelberg, New York)1987
- [7] Dorso C. O., Hernández E. S. and Vega J. L., *Phy. Rev.* E49, 300(1992).
- [8] A.I. Ajeizer y S.V. Peletmiski: *Métodos de la física Estadística*. (MIR, Moscú 1981).
- [9] Spitzer L. and Härm R., *Phys. Rev.* 89(1953) 977.
- [10] Rosenbluth M. N., MacDonald W. M. and Judd D. L., *Phys. rev.* 107(1957)1.
- [11] San Miguel M., *Z. Physik* B24, 307(1979)
- [12] Soler, M., *Phys. Lett.* A140, 373,377, (1989)
- [13] Martínez F. C. and Soler M., *Eur. J. Mech. B/Fluids*, 11,555(1992).
- [14] Soler M., Martínez F. C., Donoso J. M., *J. St. Phys.*, 69, 813(1992).
- [15] Donoso J. M. , Soler M., *Europhys. Lett.*, 23 (1993) 409.
- [16] Donoso J. M. , Soler M., *Europhys. Lett.*, 27 (1994) 135.
- [17] Adams J. B: and Hitchon W. N: G., *J. Comput. Phys.* 76, 159(1988)
- [18] Hitchon W. N. G., Koch D. J. and Adams J. B., *J. Comput. Phys.* 83, 95(1989)
- [19] Parker G. J., Hitchon W. N: G., Lawler J.E., *J. Comput. Phys.* 106, 147(1993)
- [20] Hara, H., *Z. Physik* B36, 369(1980)
- [21] Berezin YU. A., Khudick V. N. and Pekker M. S., *J. Comput. Phys.* 69, 163 (1987)

- [22] Robson R. E., Ness K. F., Sneddon G. E. and Vienland L. A., *J comput, Phys.* 92, 213(1991)
- [23] *J. Comput. Phys.* 97, 249(1991)
- [24] Epperlein E. M., *J. Comput. Phys.* 112, 291(1994)
- [25] Karney C. F. F., *Comp. Phys. Rep.* 4, 183(1986).
- [26] Karney C. F. F. and Fish N. J. , P.P.P.L. report, PPPL-2222(1985).
- [27] Karney C. F. F. and Box P. O., P.P.P.L. report, PPPL-2290(1985).
- [28] Hilbert D., *Math. Ann.* 72, 562(1912)
- [29] Enskog, D. Inaugural Dissertation, Uppsala (1917).
- [30] Braginskii S. I., *Reviews in Plasma Physics* 1, vol. I, (Consultans Boureau, New York, 1965). p205
- [31] Trubnikov B. A., *Reviews of Plasma Physics* 1, vol. I, (Consultants Boureau, New York, 1965). p105
- [32] Haken H., *Z. Physik* B24, 321(1976)
- [33] Wissel C., *Z. Physik* B35, 185(1979)
- [34] Weiss U., *Z. Physik* B30, 429(1978)
- [35] Greiner A., Strittmatter W. and Honerkamp J., *J. St. Phys*, 51, 95(1988).
- [36] Nuncio Mantegna R., *J St. Phys.* 70, 721(1992).

Capítulo 2

Fundamentos del Método Integral Numérico.

En este capítulo se presentan los fundamentos esenciales del nuevo método computacional propuesto en el trabajo para la resolución de las ecuaciones cinéticas de Fokker-Planck en su sentido más genérico, establecido en el primer capítulo. El procedimiento puede ser generalizado, en principio, para cualquier ecuación de evolución temporal de la densidad de probabilidad $f(\mathbf{q}, t)$. Sin embargo toda la exposición está referida principalmente a ecuaciones que presentan la evolución de f en la forma de una ecuación tipo Fokker-Planck (EFP). La descripción global de un sistema físico caracterizado localmente por el conjunto N -dimensional de variables estocásticas $\{\mathbf{q}(t)\}$ se lleva a cabo a través de la ecuación diferencial para la densidad de probabilidad, que en Física Estadística se interpreta como la función de distribución $f(\mathbf{q}, t)$. La base teórica que inspira el método se encuentra, por tanto, en la interpretación de la naturaleza estocástica de los procesos descritos por la ecuaciones abordadas mediante la aplicación directa de algunos presupuestos básicos de la teoría de procesos estocásticos.

El método propuesto ha de dar respuesta al problema de la evolución temporal de la función de distribución $f(\mathbf{q}, t)$ ya que no sólo se pretende tratar el estado de equilibrio, sino que interesa encontrar un procedimiento mediante el cual sea posible describir satisfactoriamente, desde el punto de vista físico, la función de distribución en todo instante t . Igualmente el método ha de ser totalmente satisfactorio para ilustrar la descripción de los procesos estacionarios, con el fin de vertebrar un potente algoritmo que permita, en el futuro, investigar sobre las propiedades de los sistemas físicos tras alcanzar dicho estado. En particular nuestro grupo se halla interesado en el cálculo de los coeficientes cinéticos de transporte: la conductividad térmica, la resistividad y la viscosidad.

Los procedimientos para la resolución de ecuaciones tipo Fokker-Planck estudiados en la literatura resultan, salvo excepciones para casos especialmente simples, intratables desde el punto de vista analítico. La compleja dependencia funcional de los coeficientes de convección y difusión en la EFP objeto de este estudio, conlleva la necesidad de recurrir a linealizaciones para obtener soluciones semianalíticas, procesos que, inevitablemente, desvirtúan la

propia naturaleza alineal de los procesos descritos por la ecuación de evolución. Por esta razón, la aplicación del método desarrollado en este capítulo, requiere el uso de cálculos numéricos, acordes con la naturaleza de la aproximación analítica que constituye su base teórica. Así pues, en primer lugar se establecen las ecuaciones analíticas para la evolución de f ; posteriormente se plantea el algoritmo numérico para la aplicación de las ecuaciones anteriores.

Los procedimientos numéricos habituales, basados en aproximaciones en diferencias finitas o elementos finitos, han sido suficientemente estudiados en la literatura. Sin embargo estos métodos, a pesar de los resultados satisfactorios en los problemas de evolución, presentan el inconveniente de no dar respuesta clara a los procesos de conservación de las magnitudes físicas involucradas en el problema. Por esta razón el método integral propuesto ha de mejorar, o resolver el problema de las magnitudes físicas conservativas, tanto en el desarrollo de la evolución temporal como en el estado de equilibrio. En este sentido se pretende contribuir a la mejora en el tratamiento de las magnitudes conservativas implícitas en la ecuación cinética.

2.1 Fundamentos teóricos.

El nuevo método numérico propuesto en este trabajo, desarrollado ya en su primera fase por otros componentes de nuestro grupo [1], [2], se propone dar una solución numérica para la Ecuación Integral de Fokker-Planck. En primer lugar, se pretende desarrollar un algoritmo computacional para el que no sea necesario recurrir a linealizaciones, o cálculos de naturaleza perturbativa, reiteradamente aplicados por otras técnicas que resuelven el problema numérica o analíticamente.

La fundamentación última del método numérico integral se inspira en las consideraciones generales, revisadas en el primer capítulo, para el avance temporal de la función de distribución f en la ecuación diferencial de Fokker-Planck.

El problema fundamental consiste en derivar la expresión para la densidad de probabilidad, que se notará por $f(\mathbf{q}, t)$, conocida la condición inicial $f(\mathbf{q}, 0) = f_0(\mathbf{q})$. Para cualquier proceso de naturaleza estocástica sobre el conjunto de variables $\{\mathbf{q}(t)\}$ la función f se encuentra descrita por la ecuación de evolución

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \mathcal{L}f(\mathbf{q}, t),$$

donde \mathcal{L} representa, de forma general, un operador integro-diferencial.

La relación entre $f(\mathbf{q}, t)$ y $f(\mathbf{q}, 0)$ define la existencia de un operador de evolución temporal $\mathcal{U}_{t,t'}$ tal que, para $t > t' > 0$ se satisface la relación formal

$$f(\mathbf{q}, t) = \mathcal{U}_{t,0}f_0(\mathbf{q}), \quad t > 0. \quad (2.1)$$

El operador $\mathcal{U}_{t,t'}$ es en general un operador integral, lo que permite reescribir (2.1) como

$$f(\mathbf{q}, t) = \mathcal{U}_{t,t'} f(\mathbf{q}, t') = \int_{\mathcal{D}} f(\mathbf{q}', t') \Pi(\mathbf{q}, t | \mathbf{q}', t') d^N q' \quad (2.2)$$

donde la integral ha de extenderse sobre todo el dominio \mathcal{D} de f .

Las propiedades del núcleo integral Π se dependen de aquéllas relativas a la familia de operadores integrales $\{\mathcal{U}_{t,t'}\}$:¹

$$\lim_{t \rightarrow t'} \mathcal{U}_{t,t'} = \mathcal{I}$$

$$\lim_{t \rightarrow t'} \mathcal{U}_{r,t} = \mathcal{U}_{r,t'}$$

$$\mathcal{U}_{t,t'} = \mathcal{U}_{t'',t'} \mathcal{U}_{t,t''}, \quad t' \leq t'' \leq t$$

donde \mathcal{I} simboliza la matriz identidad. Las relaciones anteriores permiten inferir, atendiendo a (2.2), las propiedades generales de los núcleos integrales Π . Así para $t \geq t'' \geq t'$ se tiene:

$$\lim_{t \rightarrow t'} \Pi(\mathbf{q}, t | \mathbf{q}', t') = \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \quad (2.3)$$

$$\Pi(\mathbf{q}, t | \mathbf{q}', t') = \int_{\mathcal{D}} \Pi(\mathbf{q}, t | \mathbf{r}, t'') \Pi(\mathbf{q}'', t'' | \mathbf{q}', t') d^N \mathbf{q}'' \quad (2.4)$$

Los operadores $\Pi(\mathbf{q}, t | \mathbf{q}', t')$ se denominan propagadores y, en general, no pueden ser interpretados como probabilidades de transición, interpretación que sí puede aplicarse para el caso particular $\Pi(\mathbf{q}, t | \mathbf{q}', 0)$. Sin embargo, para procesos markovianos $\Pi(\mathbf{q}, t | \mathbf{q}', t')$ siempre representa la probabilidad de transición o probabilidad condicional $P(\mathbf{q}, t | \mathbf{q}', t')$, lo que permite dotar de significado físico a los operadores integrales definidos para casos generales. El operador \mathcal{L} objeto de este trabajo, presenta la forma de un operador de Fokker-Planck L_{FP} citado en la Introducción

$$\mathcal{L}(\mathbf{q}, t) = L_{FP}(\mathbf{q}, t) = -\frac{\partial}{\partial q_i} \{A_i(\mathbf{q}, t) - \frac{\partial}{\partial q_j} D_{ij}(\mathbf{q}, t)\} \quad (2.5)$$

donde la dependencia en \mathbf{q} y t en los coeficientes A_i y D_{ij} puede desprenderse de una relación integral con la propia función $f(\mathbf{q}, t)$, como en el caso que de la ecuación integral de Fokker-Planck en la Física del Plasma. Este hecho supone que el núcleo integral de los operadores de avance temporal, \mathcal{U} depende de la condición inicial en el instante $t_0 = 0$, lo que se traduce en un marcado carácter no markoviano en la descripción local para las variables estocásticas $\mathbf{q}(t)$ implícita en (2.1). De forma general, se supondrá que tal dependencia se encuentra explicitada y que, por tanto, A_i y D_{ij} son funciones cualesquiera del tiempo y de las variables $\{\mathbf{q}\}$. Sin embargo es preciso señalar de nuevo que al menos formalmente, existen los propagadores Π para cualquier proceso dado por (2.1) con el operador particular L_{FP} , con independencia de su carácter no markoviano.

La relación (2.2) aparece en la teoría de los procesos estocásticos para la probabilidad condicional $P(\mathbf{q}, t | \mathbf{q}', t')$ y se reconoce con el nombre de *Ecuación de Consistencia*

$$f(\mathbf{q}, t) = \int_{\mathcal{D}} f(\mathbf{q}', t') P(\mathbf{q}, t | \mathbf{q}', t') d^N \mathbf{q}' \quad (2.6)$$

que, en los procesos markovianos, es también válida para la probabilidad de transición P según

$$P(\mathbf{q}, t | \mathbf{q}', t') = \int_{\mathcal{D}} P(\mathbf{q}, t | \mathbf{q}'', t'') P(\mathbf{q}'', t'' | \mathbf{q}', t') d^N \mathbf{q}'' \quad (2.7)$$

¹ véase por ejemplo la referencia [3]

La ecuación (2.7) se conoce con el nombre de *Ecuación Integral de Chapman-Kolmogorov* para la probabilidad condicional. De (2.7) puede derivarse, bajo ciertas condiciones, la ecuación diferencial correspondiente a la función P y, consecuentemente, para $f(\mathbf{q}, t)$. Gardiner ([4]) propone a este efecto una ecuación diferencial en la que, además de contenerse los efectos de difusión y deriva, representados mediante un operador en la forma (2.5), se incluye la posible existencia de procesos de transición o saltos, esto es, la posibilidad de discontinuidades en las funciones $q(t)$. Estos efectos se contabilizan a través de un operador integral cuyo núcleo depende de la probabilidad de transición por unidad de tiempo $W(\mathbf{q}|\mathbf{q}', t)$. Las condiciones bajo las cuales no aparece este segundo operador ($W = 0$) se especifican claramente en esta referencia, y se citarán posteriormente como condiciones para una apropiada definición del operador $\mathcal{U}_{t+\tau, t}$ en el límite $\tau \rightarrow 0$.

En general como los procesos descritos por las ecuaciones de Fokker-Planck que ocupan este trabajo no presentan carácter markoviano, (2.7) no es válida y habrá de ser sustituida por (2.4). Sin embargo, la relación de consistencia (2.6) sí se mantiene válida para cualquier proceso. Este hecho permite definir un generador infinitesimal de la familia de operadores $\{\mathcal{U}_{t, t'}\}$ determinado por la ecuación de evolución

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \mathbf{L}_{FP} f(\mathbf{q}, t) \quad (2.8)$$

de tal modo que

$$f(\mathbf{q}, t + \tau) = \int_{\mathcal{D}} P(\mathbf{q}, t + \tau | \mathbf{q}', t) f(\mathbf{q}', t) d^N q' \quad (2.9)$$

donde el propagador $\Pi = P$ puede, en virtud de (2.6), interpretarse como una probabilidad de transición o probabilidad condicional, para la evolución de la función de distribución f , desde la condición inicial $f(\mathbf{q}, t_0 = t)$ hasta $f(\mathbf{q}, t = t_0 + \tau)$, con $\tau \geq 0$. Por esta razón, en lo que resta de exposición, P se denotará indistintamente con los nombres de *propagador* y *probabilidad de transición*.

El formalismo de operadores integrales descrito en los párrafos precedentes, constituye la fundamentación teórica del procedimiento de avance temporal para $f_0(\mathbf{q})$ propuesto en este trabajo. Dado que la propiedad (2.3) es cierta para cualquier propagador Π sea o no interpretado como probabilidad de transición, (2.9) y (2.8) definen conjuntamente la ecuación, a primer orden en $\tau = t - t'$ satisfecha por $P(\mathbf{q}, t + \tau | \mathbf{q}', t)$

$$P(\mathbf{q}, t + \tau | \mathbf{q}', t) = \{1 + \tau \mathbf{L}_{FP}(\mathbf{q}, t) + O(\tau^2)\} \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}'). \quad (2.10)$$

La expresión anterior se interpreta a su vez como la aproximación a primer orden en τ , cuando $\tau \rightarrow 0$, de la solución formal para la ecuación de Fokker-Planck con operador \mathbf{L}_{FP} de coeficientes difusivos dependientes del tiempo

$$P(\mathbf{q}, t | \mathbf{q}', t') = \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') + \quad (2.11)$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \int_{t'}^t dt_1 \dots \int_{t'}^{t_{n-1}} dt_n \mathbf{L}_{FP}(\mathbf{q}, t_1) \dots \mathbf{L}_{FP}(\mathbf{q}, t_n) \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$$

denominada *Serie de Dyson* [5], que en el caso de independencia temporal del operador L_{FP} , con $\tau = t - t'$, adquiere la forma

$$P(\mathbf{q}, t | \mathbf{q}', t') = e^{\tau L_{FP}(\mathbf{q})} \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \quad (2.12)$$

La probabilidad de transición P_τ para cortos intervalos temporales $\tau = t - t'$, ha de ser coherente con el problema en estudio, esto es, la función P_τ debe ser consistente con la ecuación diferencial (2.8) a la cual representa en el límite $\tau \rightarrow 0$. La evolución temporal de $f(\mathbf{q}, t)$ quedará resuelta mediante la aplicación recursiva de (2.6). De (2.10) puede obtenerse, por los procedimientos que se muestran en secciones posteriores, la probabilidad de transición a tiempos cortos P_τ que depende de los coeficientes A_i y D_{ij} evaluados en el instante t .

Así pues (2.6) proporciona un procedimiento explícito de avance temporal para la función de distribución f , válido hasta segundo orden de potencias en el paso temporal τ . Salvo en casos especialmente simples, la integral implícita en (2.9) resulta irresoluble analíticamente, por ello es necesario diseñar un procedimiento de integración numérica sobre el conjunto de variables $\{\mathbf{q}\}$, consistente con el hecho de que P_τ es una función con un máximo pronunciado en $\mathbf{q} = \mathbf{q}'$ para pequeños valores de τ .

2.2 La función $P_\tau(\mathbf{q}, \mathbf{q}' | t)$.

La primera dificultad técnica radica, pues, en encontrar lo que se ha denominado *probabilidad de transición a tiempos cortos* $P_\tau(\mathbf{q}, \mathbf{q}' | t) = P(\mathbf{q}, t + \tau | \mathbf{q}, t)$ para cada problema en particular. Son numerosos los procedimientos analíticos desarrollados en la literatura sobre el cálculo del propagador infinitesimal P_τ [6], [7], [8]. En la referencia [8] puede encontrarse un procedimiento general que dispensa toda una clase de probabilidades de transición equivalentes, mediante el uso de transformadas de Fourier en las variables espaciales, cuando el dominio de la función densidad de probabilidad se extiende a todo el espacio. El procedimiento habitualmente utilizado para determinar la expresión de P_τ consiste en representar la función $\delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$ por su transformada integral de Fourier y aplicar directamente (2.10). Sin embargo la función δ es, realmente, una función arbitraria, ya que ésta puede representarse a través de cualquier conjunto $\{\mathcal{F}(\lambda, \mathbf{q})\}$ de funciones ortogonales. No obstante, puede demostrarse ([8]) que todas las funciones P_τ aplicables a cada problema particular, constituyen los elementos de un conjunto de probabilidades de transición equivalentes y que, por tanto, conducen a la misma solución para la ecuación de Fokker-Planck en el límite $\tau \rightarrow 0$.

La expresión más utilizada para P_τ

$$P_\tau = \frac{1}{\|D'\|^{1/2} (4\pi\tau)^{N/2}} \exp \left[- \frac{D'_{ij}{}^{-1} (q_i - q'_i - A'_i \tau) (q_j - q'_j - A'_j \tau)}{4\tau} \right] \quad (2.13)$$

$$D'_{ij} = D_{ij}(\mathbf{q}', t); \quad A'_i = A_i(\mathbf{q}', t); \quad i, j = 1, \dots, N; \tau > 0$$

se obtiene por el procedimiento referenciado en el párrafo anterior. Los coeficientes de difusión y deriva se encuentran evaluados en las variables fuente \mathbf{q}' en el instante t . $D'_{ij}{}^{-1}$ son los elementos de la matriz inversa correspondientes a la matriz de difusión simétrica

—supuesta definida positiva— y $||D'||$ es su determinante. Para la resolución de (2.10) se ha hecho uso de la propiedad $G(\mathbf{q})\delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') = G(\mathbf{q}')\delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$. Esta característica se encuentra en estrecha relación con el significado físico de P . Dado que τ es infinitesimal, la información contenida en el paquete inicial $P(\mathbf{q}, t|\mathbf{q}', t) = \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$ no sufre dispersión significativa: la forma funcional de (2.13) se justifica entonces atendiendo a la representación de la función δ como límite de la distribución maxwelliana (2.13) cuando $\tau \rightarrow 0$, pudiéndose evaluar los coeficientes de difusión y deriva sobre las variables fuente \mathbf{q}' .

En (2.13) todas las derivadas sobre las funciones A_i y D_{ij} se hallan implícitas en la representación de la función δ . La expresión (2.13) es diferente si se desarrollan las operaciones contenidas en el operador L_{FP} . El argumento de la exponencial contiene las derivadas parciales correspondientes sobre $A_i(\mathbf{q}, t)$ y $D_{ij}(\mathbf{q}, t)$, que se evalúan en las variables de campo \mathbf{q} en lugar de \mathbf{q}' —véase (2.18)—. Entre estos dos casos extremos, es posible desarrollar un conjunto de funciones P_τ en las que la dependencia funcional de los coeficientes de convección y difusión se halle parcialmente implícita en la función δ de Dirac, como propone Wissel en el trabajo [8].

2.2.1 Propiedades de P_τ .

La representación de la probabilidad de transición para un corto tiempo de evolución τ , como se ha indicado, no es única. En cualquier caso, tal representación δ ha de ser coherente con la naturaleza de cada problema particular, lo que presupone la adaptación de ésta a las condiciones particulares de la ecuación tipo Fokker-Planck tratada. En particular, (2.13) está definida sobre todo el espacio, por lo que no se halla normalizada en general, sobre la región \mathbb{R} prescrita por el dominio \mathcal{D} de la función $f(\mathbf{q}, t)$.

En consecuencia, en lo relativo a la correcta normalización de P_τ , la representación de la función δ para (2.10) habría de construirse sobre una base $\{\mathcal{F}(\lambda, \mathbf{q})\}$ de funciones ortogonales definidas sobre \mathcal{D} . Este procedimiento permitiría, a su vez, generar la representación δ coherente con las condiciones de frontera de cada problema particular (2.5). La elección del conjunto $\{\mathcal{F}(\lambda, \mathbf{q})\}$ obviamente no resulta sencilla, máxime si se pretende que la serie (o integral sobre los autovalores del espectro $\{\lambda\}$) conduzca a una expresión compacta y tratable para P_τ .

Para agravar el problema de la normalización, esta condición no ha de ser la única propiedad satisfecha por el propagador a tiempos cortos. Ya que, esencialmente, P_τ debe ser una aproximación del propagador verdadero $P(\mathbf{q}, t + \tau|\mathbf{q}, t)$, cuya expresión se desconoce, las propiedades generales de éste han de contenerse en P_τ sobre el límite $\tau \rightarrow 0$. Estas características se inferen directamente de las correspondientes propiedades de la ecuación tipo Fokker-Planck representada por L_{FP} . Si tanto A_i como D_{ij} se consideran funciones explícitas en las variables \mathbf{q} y t , las propiedades que ha de verificar P_τ se fundamentan en la consistencia con el problema que pretende representar. En otras palabras, este hecho supone afirmar que cualquier derivación de la función δ de Dirac, de la que se infiera P_τ , puede no conducir al problema particular descrito por L_{FP} . Como contraejemplo, baste señalar que

$$\Pi = P_\tau = \frac{2[2\tau D(q', t)]^{3/2}}{\pi [[q - q' - A(q', t)\tau]^2 + 2\tau D(q', t)]^2}$$

2.2.1. Propiedades de P_τ .

satisface (2.3)² para cierta ecuación unidimensional en $]-\infty, \infty[$, sin embargo no reproduce un problema tipo Fokker-Panck de coeficientes difusivos $A(q, t)$ y $D(q, t)$ pues, a pesar de que de esta expresión se obtienen las funciones $A(q', t)$ y $D(q', t)$ según el desarrollo de Kramers-Moyal (1.4) y (1.5), los momentos de orden superior al segundo no están definidos, al ser divergentes las integrales $\int q^k \Pi dq$ para $k \geq 3$.

En consonancia con la ecuación de evolución integral (2.9), con relación a (2.8), la probabilidad de transición a tiempos cortos, en cualquier caso, debe satisfacer las siguientes propiedades analíticas:

1.- Su norma sobre el dominio \mathcal{D} en sus variables ha de ser la unidad, esto es

$$\int_{\mathcal{D}} P_\tau(\mathbf{q}, \mathbf{q}'|t) d^N \mathbf{q} = 1, \quad (2.14)$$

2.- en el límite $\tau \rightarrow 0$ ha de conducir al valor exacto de los momentos de primer y segundo orden, siendo nulos los momentos de orden superior

$$D_i^{(1)} = A_i(\mathbf{q}', t) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \int_{\mathcal{D}} \frac{q_i - q'_i}{\tau} P_\tau(\mathbf{q}, \mathbf{q}'|t) d^N \mathbf{q} \quad (2.15)$$

$$D_{ij}^{(2)} = D_{ij}(\mathbf{q}', t) = \frac{1}{2} \lim_{\tau \rightarrow 0} \int_{\mathcal{D}} \frac{(q_i - q'_i)(q_j - q'_j)}{\tau} P_\tau(\mathbf{q}, \mathbf{q}'|t) d^N \mathbf{q} \quad (2.16)$$

3.- y, obviamente, ha de satisfacer la condición inicial

$$P_{\tau=0}(\mathbf{q}, \mathbf{q}'|t) = \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}').$$

La propiedad (2.14) habría de expresarse también en función del límite en τ tendiendo a cero, no obstante, en función del uso asignado a la probabilidad de transición a tiempos cortos en este trabajo, es conveniente que P_τ se encuentre normalizada a la unidad para cualquier valor finito del paso temporal. Como las integrales de (2.9) se han de procesar numéricamente con τ finito, no de modo analítico según (1.17), si $f(\mathbf{q}, t)$ preserva constante la norma en la evolución, con (2.14) se consigue preservar esta característica en cada iteración. Numéricamente podría procederse a la renormalización de P_τ , sin embargo, como se verá en el siguiente capítulo, la convergencia hacia la solución verdadera se ve notablemente alterada con este procedimiento. Así mismo sería también conveniente que (2.15) y (2.16) se mantuviesen para τ finito, especialmente se f preserva los momentos de primer y segundo orden constantes.

A las propiedades anteriores puede añadirse la condición de que P_τ no genere la existencia de una probabilidad de transición por unidad de tiempo $W(\mathbf{q}|\mathbf{q}', t)$, ello supondría adición a L_{FP} de un operador integral con núcleo $W f(\mathbf{q}', t)$ que contabilizaría los efectos de discontinuidades en las variables estocásticas microscópicas $\{\mathbf{q}(t)\}$, como se indicó anteriormente. Según Gardiner en [4], si se pretende que el operador \mathcal{L} coincida con L_{FP} ha de cumplirse que, para todo $\epsilon \geq 0$, exista el límite

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{P(\mathbf{q}, t + \tau | \mathbf{q}', t)}{\tau} = W(\mathbf{q}|\mathbf{q}', t) = 0 \quad (2.17)$$

²y además (2.4) con A y D constantes

uniforme en \mathbf{q} y \mathbf{q}' , con $|\mathbf{q} - \mathbf{q}'| \geq \epsilon$.

Puede comprobarse fácilmente que (2.13) satisface todas las condiciones anteriores si cada componente q_i de $\{\mathbf{q}\}$ se define sobre el intervalo $] -\infty, \infty[$. En gran número de problemas físicos la representación maxwelliana de P_τ resulta adecuada para el proceso de implementación de f descrito por (2.9). No obstante, son también numerosos los problemas que exigen la resolución de (2.8) bajo condiciones de contorno específicas. Es deseable pues, que la probabilidad de transición a tiempos cortos sea coherente con las condiciones de frontera impuestas por el problema original. Resulta en extremo esencial para preservar el conjunto de propiedades anteriores, que P_τ esté normalizada en \mathcal{D} si $f(\mathbf{q}, t)$ preserva su norma constante en el tiempo, como se indicó en el párrafo anterior. Esta propiedad está íntimamente relacionada con la reproducción de las condiciones de contorno específicas de cada problema. En la sección siguiente se da un sencillo modelo de cálculo para P_τ que resuelve la cuestión sobre las condiciones de frontera, hecho esencial para una coherente descripción numérica de cualquier sistema físico.

2.2.2 Cálculo de P_τ .

La elección apropiada de la función $P_\tau(\mathbf{q}, \mathbf{q}'|t)$ consistente con la ecuación tipo Fokker-Planck particular, depende esencialmente de la representación utilizada en (2.10) para $\delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$. Este problema puede resolverse de una forma sencilla haciendo uso de las propiedades de la función δ de Dirac. A tal efecto, nuestro grupo propone un procedimiento simple y general para determinar una probabilidad de transición a tiempos cortos, que satisfaga las propiedades expuestas en la sección anterior.

En (2.13) se hallan implícitas en la misma función δ las derivadas sobre los términos A_i y D_{ij} . Si el operador L_{FP} se desarrolla en sus derivadas respecto a las variables q_i y q_j , y $\delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$ se representa mediante su transformada de Fourier, la expresión de P_τ varía ([6]), concretamente

$$P_\tau = \frac{e^{-\tau \Omega(\mathbf{q}, t)}}{\|D\|^{1/2} (4\pi\tau)^{N/2}} \exp \left[-\frac{D_{ij}^{-1} (q_i - q'_i - \tau Q_i) (q_j - q'_j - \tau Q_j)}{4\tau} \right] \quad (2.18)$$

$$Q_k(\mathbf{q}, t) = A_k - 2 \frac{\partial}{\partial q_m} D_{km}; \quad \Omega(\mathbf{q}, t) = \frac{\partial}{\partial q_k} \left[A_k - \frac{\partial}{\partial q_m} D_{km} \right]$$

donde las derivadas sobre los coeficientes difusivos, evaluados ahora sobre las variables de campo $\{\mathbf{q}\}$, se hallan explicitadas en el operador integral y, por tanto, no contabilizadas implícitamente en la representación de la función δ de Dirac.

Es factible inferir una expresión para P_τ en la que las derivadas sobre los coeficientes difusivos se hallen parcialmente implícitas en δ , obteniendo toda una gama de probabilidades de transición $\{P_\tau^\mu\}$ equivalentes en el límite $\tau \rightarrow 0$. Wissel, en [8] sugiere la posibilidad de utilizar como propagador una combinación lineal de todas las funciones P_τ^μ según $P_\tau = \sum_\mu \alpha_\mu P_\tau^\mu$, con $\sum_\mu \alpha_\mu = 1$. Debe notarse que (2.18) no se halla, en general, normalizada a la unidad para τ finito, lo que representa un inconveniente para preservar la norma de la distribución f en un esquema numérico integral. Por otra parte, las derivadas sobre A_i y D_{ij}

habrían de calcularse también numéricamente si estas funciones no se encuentran explicitadas en q y t , lo que podría suponer una fuente adicional de errores de truncamiento. Para los fines de esta investigación se ha considerado imprescindible obtener una probabilidad de transición que verifique las propiedades de la sección 2.2.1 en su integridad, para ello se sugiere el sencillo método que a continuación se describe, a pesar de que las expresiones alternativas dadas anteriormente puedan ser útiles para ciertos problemas.

El proceso seguido para inferir (2.13) supone reescribir (2.10) como ³

$$P_\tau = \{1 + \tau L_{FP}(q, t) + O(\tau^2)\} \delta(q - q') \approx e^{\tau L_{FP}^*(q; q', t)} \delta(q - q') \quad (2.19)$$

donde L_{FP}^* ($q; q', t$) es un operador tipo Fokker-Planck de coeficientes difusivos evaluados en las variables fuente q' , ya que se ha aplicado la propiedad

$$G(q) \delta(q - q') = G(q') \delta(q - q')$$

para $A_i(q, t)$ y $D_{ij}(q, t)$, sin efectuar previamente las operaciones $\partial A_i / \partial q_i$ y $\partial D_{ij} / \partial q_i \dots$ indicadas en L_{FP} sobre tales coeficientes.

En virtud de la solución general a (2.19) dada por (2.13), el operador L_{FP}^* actúa sobre una función P_τ cuya dependencia en τ se presenta como $1/\sqrt{\tau} \exp[-K^2/\tau]$; por tanto, para $K = K(q; q', t) \neq 0$ el término $[\tau L_{FP}^*]^n P_\tau$ genera los sumandos $\exp[-K^2/\tau] / [\tau^n \sqrt{\tau}]$, representados simbólicamente por $O(\tau^n)$, que decaen a cero más rápidamente que cualquier potencia en τ^n , en el límite $\tau \rightarrow 0$.

La propiedad anterior justifica la aproximación efectuada en (2.19) a través del operador exponencial en τL_{FP}^* . En cambio, si $K = 0$ (cuando $q = q'$) la serie es claramente divergente. No obstante, ha de tenerse presente que P_τ sirve como núcleo integral del operador $\mathcal{U}_{t+\tau, t}$ que ha de actuar sobre la función $f(q, t)$ para dar $f(q, t + \tau)$ y, si f es una función bien comportada en el sentido de distribuciones, especialmente si satisface la condición de normalización, es de esperar que tras la integración oportuna sobre las variables fuente $\{q'\}$ se elimine la dependencia en $1/[\tau^n \sqrt{\tau}]$ permaneciendo el comportamiento asintótico según $\exp[-\kappa^2(q, t)/\tau] / [\tau^n \sqrt{\tau}]$ —con κ distinta de cero— y la serie resulte convergente, como se desprende al observar que $f(q, t + \tau)$ sigue siendo una función densidad de probabilidad, reduciéndose a $f(q, t)$ en el límite $\tau \rightarrow 0$. Así pues (2.19), y el resto de las relaciones similares que se presentan en lo sucesivo, ha de interpretarse realmente en la forma

$$f(q, t + \tau) \approx \int_{\mathcal{D}} f(q', t) e^{\tau L_{FP}^*} \delta(q - q') d^N q' \quad (2.20)$$

para una derivación más rigurosa de P_τ . Sin embargo, como se verá en el siguiente capítulo, P_τ puede ser válida incluso para avanzar en el tiempo el propio propagador $P(q, t | q_0, 0)$ que parte de la condición inicial $\delta(q - q_0)$ para $t = 0$.

Si en lugar de escribir (2.19) para $L_{FP}^* A_i \delta$ y $D_{ij} \delta$ se factorizan de la forma

$$\begin{aligned} A_i(q, t) \delta(q - q') &= \alpha_i(q', t) a_i(q, t) \delta(q - q') \\ D_{ij}(q, t) \delta(q - q') &= \beta_{ij}(q', t) d_{ij}(q, t) \delta(q - q') \end{aligned} \quad (2.21)$$

³ya que la adición de términos en orden τ^2 no altera este límite, es decir:

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} [1 + \alpha\tau + O(\tau^2)]^{1/\tau} = e^\alpha$$

la ecuación (2.19) puede presentarse ahora en términos del nuevo operador auxiliar \mathbf{L}_{FP}^* ($\mathbf{q}; \mathbf{q}', t$) definido por

$$\mathbf{L}_{FP}^*(\mathbf{q}; \mathbf{q}', t) = -\frac{\partial}{\partial q_i} \{a_i(\mathbf{q}, t)\alpha_i(\mathbf{q}', t) - \beta_{ij}(\mathbf{q}', t) \frac{\partial}{\partial q_j} d_{ij}(\mathbf{q}, t)\} \quad (2.22)$$

de tal forma que

$$P_\tau = e^{\tau \mathbf{L}_{FP}^*(\mathbf{q}; \mathbf{q}', t)} \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}'), \quad (2.23)$$

puede entenderse como la solución formal de la EFP auxiliar

$$\frac{\partial P_\tau}{\partial \tau} = \mathbf{L}_{FP}^* P_\tau(\mathbf{q}, \tau | \mathbf{q}^*, 0) \quad (2.24)$$

donde t como \mathbf{q}' se consideran ahora parámetros constantes. Las factorizaciones (2.21) generan $N^2 + N$ funciones auxiliares β_{ij} y α_i , en sustitución de A_i y D_{ij} para la expresión más común (2.13). En general, la forma presentada para estas factorizaciones es sólo orientativa; así, por ejemplo, si cada d_{ij} se identifica con la unidad cada $\beta_{ij}(\mathbf{q}', t)$ coincidirá con $D_{ij}(\mathbf{q}', t)$. Esta opción obliga a definir la función A_i de forma que se originen N nuevas funciones $\tilde{\alpha}_k$, tal que $A_i \delta$ se reescriba como

$$A_i(\mathbf{q}, t) \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') = \tilde{\alpha}_j(\mathbf{q}, t) D'_{ij}(\mathbf{q}', t) \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}').$$

Esta nueva factorización simplifica notablemente la resolución de la ecuación auxiliar (2.24), pues los coeficientes $D_{ij}(\mathbf{q}', t)$ se consideran constantes a este efecto. En concreto, si cada $\tilde{\alpha}_j(\mathbf{q}, t)$ se puede interpretar como derivada de cierto potencial $\phi(\mathbf{q}, t)$ según

$$\tilde{\alpha}_j = -\frac{\partial \phi}{\partial q_j} \quad \text{con} \quad \frac{\partial \tilde{\alpha}_k}{\partial q_m} = \frac{\partial \tilde{\alpha}_m}{\partial q_k},$$

el propagador $P_\tau(\mathbf{q}, \tau | \mathbf{q}^*, 0)$ será la solución de (2.24) para una probabilidad de transición que presenta como solución 'estacionaria' ⁴ la función $P_s = \mathcal{N} \exp[-\phi]$ con t y \mathbf{q}' tratados como parámetros constantes. Este hecho favorece la conversión de (2.24) a una ecuación tipo Schrödinger y la correspondiente reducción de la misma a un problema de autovalores, para dar la solución en la forma (1.14) [6] y obtener así una apropiada representación de la función δ de Dirac.

Para muchos de los problemas físicos tratados, f evoluciona hasta la distribución maxwelliana de equilibrio. Esta característica contribuye a configurar claramente la forma funcional de las funciones α_i y d_{ij} , en las que es posible introducir la dependencia asintótica en las fronteras de la región \mathbf{R} donde está definida la ecuación, a fin de integrar en P_τ las condiciones de frontera del problema general. Debe notarse que en (2.23) el operador \mathbf{L}_{FP}^* ha de entenderse dependiente sólo de \mathbf{q} y no del 'tiempo' auxiliar τ . Este hecho propicia la aplicación del procedimiento de resolución basado en su reducción a un problema de autovalores, como se indicó en el párrafo precedente. Por una parte, con la factorización (2.21), la ecuación auxiliar (2.24) puede resolverse bajo la condición inicial $P_\tau(\mathbf{q}, 0 | \mathbf{q}^*, 0) = \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}^*)$ y las condiciones de frontera del problema general; por otra parte, la representación de la

⁴se entiende como estacionaria en la nueva variable temporal τ , cuando se procede al límite $\tau \rightarrow \infty$

función δ buscada puede tomarse del conjunto de funciones ortonormales $\{\phi(\lambda, \mathbf{q})\}$ que la definen para el problema auxiliar. De esta forma, la inserción de

$$\delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') = \lim_{\mathbf{q}^* \rightarrow \mathbf{q}'} \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}^*) = \int \phi(\mathbf{q}, \lambda) \phi(\mathbf{q}^*, \lambda) d^N \lambda$$

en (2.19) dará lugar a la probabilidad de transición P_τ óptima para aplicar la ecuación de evolución integral (2.9) a primer orden en τ con $P_\tau(\mathbf{q}, \mathbf{q}'|t) = P_\tau(\mathbf{q}, \tau|\mathbf{q}^*, 0)$.

El problema de encontrar la representación de la función δ para (2.19) se reduce pues, a resolver una ecuación de Fokker-Planck ordinaria en la variable temporal τ . Esta ecuación auxiliar presenta la forma habitual de las ecuaciones de evolución para la probabilidad de transición en los procesos markovianos continuos y por ello se asegura el cumplimiento de las propiedades (2.14), (2.15), (2.16) y (2.17). La apropiada elección de las factorizaciones (2.21) puede trazarse de tal modo que la ecuación diferencial auxiliar de la que se desprende la representación δ quede reducida a un problema particular conocido en la literatura para la EFP en la probabilidad de transición condicional. También puede recurrirse a cualquiera de los métodos de resolución para este tipo de problemas que se citaron en el capítulo anterior. En cualquier caso puede, a priori, elegirse el conjunto de funciones ortonormales $\{\phi(\lambda, \mathbf{q})\}$ adecuado para las condiciones de frontera del problema y elegir las factorizaciones (2.21) que generen la ecuación (2.24). Este procedimiento es válido siempre que las funciones $\alpha_i(\mathbf{q}', t)$ y $\beta_{ij}(\mathbf{q}', t)$ muestren el comportamiento óptimo para llevar a cabo la integración sobre las variables \mathbf{q}' en la ecuación integral de evolución (2.9). Ya que esta última ha de resolverse mediante procedimientos numéricos, sería conveniente que α_i y β_{ij} no presenten singularidades en la región \mathbf{R} . Si las posibles singularidades de A_i y D_{ij} se recogen sobre las funciones a_i y d_{ij} , la dependencia funcional de los coeficientes de difusión y deriva quedarán recogidas implícitamente en la representación de la función δ de Dirac. El procedimiento generador de $P_\tau(\mathbf{q}, \mathbf{q}'|t)$ presentado en esta sección, se aplica para la determinación de propagador a tiempos cortos correspondiente a la ecuación de Fokker-Planck de la Física del Plasma en los capítulos cuarto y quinto. En estos problemas la función de distribución en el equilibrio se conoce, ya que la EFP correspondiente satisface las condiciones del Teorema-H de Boltzmann ([9]). Esta propiedad sugiere, para el caso de la función de distribución reducida $f(v, t)$, sobre la componente radial de la velocidad, las factorizaciones

$$\begin{aligned} A_v(v, t)\delta(v - v') &= \left[\frac{2}{v} - v\alpha(v', t)\right]D_{vv}(v', t)\delta(v - v'), \\ D_{vv}(v, t)\delta(v - v') &= D_{vv}(v', t)\delta(v - v'), \end{aligned}$$

con lo que (2.24) se resuelve fácilmente con las condiciones de frontera sobre $v = 0$ coincidentes con las del operador original. Las funciones α y D_{vv} se encuentran acotadas en todo el rango de variación de v . Así mismo, la dependencia funcional en $2/v$ queda implícita en la representación δ en términos de funciones de Bessel reducibles a combinaciones de exponenciales. En particular, para una amplia gama de procesos físicos descritos por ecuaciones tipo Fokker-Planck, en las que se recogen los efectos de simetrías cilíndricas o esféricas, es factible derivar un operador integral $\mathcal{U}_{t+\tau, t}$ por aplicación directa de (2.19) con

$$\delta(v - v') = v \frac{g(v)}{g(v')} \int_0^\infty \left(\frac{v}{v'}\right)^\mu J_\mu(\lambda v) J_\mu(\lambda v') \lambda d\lambda$$

eligiendo convenientemente la función $g(v)$ y el operador \mathbf{L}_{FP}^* .

En general, según lo expuesto, la elección de la probabilidad de transición a tiempos cortos para cada problema no ha de suponer una limitación técnica para el desarrollo del método propuesto.

2.3 Esquema numérico.

Una vez resuelto el problema de encontrar la apropiada representación del propagador a tiempos cortos P_τ se procederá a la implementación de la función de distribución f mediante el uso de la relación de consistencia (2.6). Esta ecuación integral gobierna la evolución de $f(\mathbf{q}, 0)$ con el tiempo por lo que puede entenderse como la forma equivalente a la ecuación diferencial descrita en términos del operador \mathbf{L}_{FP} , siempre que la probabilidad condicional sea conocida. Esta última condición por lo general no puede ser satisfecha ya que la ecuación integral de evolución presenta infinitas soluciones. Son las características del proceso físico contenido en la densidad de probabilidad, las que confieren las propiedades específicas a $P_\tau(\mathbf{q}, \mathbf{q}'|t)$. Así pues, la ecuación diferencial del movimiento es la herramienta básica para determinar la probabilidad de transición. No obstante, (2.6) sirve como base para el esquema avance temporal que se pretende diseñar.

Si en (2.6) la función $f(\mathbf{q}, t)$ es conocida e interpretada como cierta condición inicial en $t_0 = t$, la función $f(\mathbf{q}, t + \tau)$ en un instante posterior $t = t_0 + \tau$ se obtendrá por aplicación directa de la ecuación integral de evolución a través de la probabilidad de transición a tiempos cortos.

2.3.1 Discretización temporal.

El formalismo de operadores integrales descrito en la primera sección del capítulo dispensa el modo de resolución de cualquier problema de naturaleza estocástica, descrito por una ecuación diferencial para la función densidad de probabilidad $f(\mathbf{q}, t)$. En particular, si el operador \mathcal{L} presenta la forma \mathbf{L}_{FP} , el problema por resolver se sintetiza en el enunciado

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \mathbf{L}_{FP}(\mathbf{q}, t)f(\mathbf{q}, t), \quad f(\mathbf{q}, 0) = f_0(\mathbf{q}), \quad \mathbf{q} \in \mathcal{D}(f), \quad t \geq 0, \quad (2.25)$$

donde f_0 es la condición inicial y $\mathcal{D}(f)$ se refiere al campo de definición de la función $f(\mathbf{q}, t)$. Al enunciado general habrá de añadirse para cada caso particular el conjunto de condiciones de contorno para f en las fronteras de la región \mathbf{R} definida por \mathcal{D} . Las condiciones de frontera pueden extraerse de la propia definición del dominio \mathcal{D} . Así, la exigencia de que las variables \mathbf{q} se hallen limitadas a la región \mathbf{R} impone, de forma general, y con el fin de mantener constante la normalización de f , que la corriente de probabilidad \mathbf{J} se anule sobre la superficie de dicha región para todo instante t . El problema (2.25) se resolverá por tanto con las condiciones de frontera denominadas habitualmente *de reflejo* para ecuaciones de Fokker-Planck.

La aplicación de (2.6) para todo valor del intervalo temporal $\tau = t - t'$ representa la solución formal al problema propuesto aunque la ecuación diferencial para el propagador $\Pi(\mathbf{q}, t|\mathbf{q}', t')$ o para la probabilidad condicional $P(\mathbf{q}, t|\mathbf{q}', 0)$, no es resoluble si tampoco lo

es problema particular (2.25) en f . No obstante, si τ se supone suficientemente pequeño, P puede sustituirse por la probabilidad de transición a tiempos cortos $P_\tau(\mathbf{q}, \mathbf{q}'|t)$. De este modo, $f(\mathbf{q}, t)$ se obtendrá de la condición inicial f_0 dividiendo el intervalo $[0, t]$ en K subintervalos de longitud $\tau = t/K$ con $t_K = t$ y $t_1 = \tau$. Si f^n representa la función de distribución f en el instante $t = t_n$ la ecuación integral de evolución (2.9) dará la forma de implementar f en la variable discretizada t_n según

$$f^{n+1}(\mathbf{q}) = f(\mathbf{q}, t_n + \tau) = \int_{\mathcal{D}} P_\tau(\mathbf{q}, \mathbf{q}'|t_n) f^n(\mathbf{q}') d^N q'. \quad (2.26)$$

Esta expresión dispensa el procedimiento básico a seguir para el avance temporal de f una vez discretizada la variable t . El esquema de discretización presentado sirve como base para determinar $f(\mathbf{q}, t_n)$ en cualquier valor de $t = t_n$, si se fija el paso temporal $\Delta t = \tau$. Así, en problemas en los que f presente solución estacionaria $f_s(\mathbf{q}) = f(\mathbf{q}, t \rightarrow \infty)$ cabe esperar que, para gran número n de iteraciones f^n se aproxime a f_s .

Ha de notarse que en (2.26) la función P_τ representa la aproximación del propagador P para pequeñas diferencias temporales $t - t'$ y, a su vez, P_τ se ha obtenido de la ecuación de Fokker-Planck auxiliar (2.24) por lo que presenta las propiedades inherentes a toda función suficientemente bien comportada en el sentido de distribuciones de probabilidad. Esta característica propicia la interpretación del esquema de avance (2.26) sobre el intervalo $[t_n, t_n + \tau]$ en términos de los conceptos generales presentados en la fundamentación teórica para el problema general sobre el intervalo $[0, t]$. De esta forma la función P_τ puede entenderse como la probabilidad de transición condicional, o función de Green, para el avance temporal de cualquier función de distribución $F_0 = f(\mathbf{q}, t_n)$ hasta $F(\mathbf{q}, \tau) = f(\mathbf{q}, t_n + \tau)$. Los procesos difusivos contenidos en la maxwelliana (2.13) o, más generalmente en P_τ , así como sus propiedades relativas a las funciones de distribución, conducen a un tratamiento óptimo, con pleno significado físico y matemático, a la solución numérica sintetizada en el esquema integral de avance temporal. En particular, según lo expuesto, cabe esperar que el procedimiento propuesto resulte esencialmente estable, en el sentido de los criterios de estabilidad en la teoría sobre esquemas en diferencias. Dado que P_τ contiene la información comprendida en el paquete inicial f^n y se halla acotada sobre la región \mathbf{R} , cabe esperar que, a medida que τ tiende a cero, existe un límite superior acotado de amplificación para este elemento de información. La condición $\lim_{\tau \rightarrow 0} P_\tau = \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$ establece la existencia de dicho límite superior por lo que, a medida que el incremento temporal disminuye, f^{n+1} se aproxima a la función inicial f^n de tal modo que el factor de amplificación $\|f^{n+1}\|/\|f^n\|$ se encuentra acotado para todo valor de τ y menor que la unidad, si $\|f\|$ representa la norma euclídea convencional.

En el siguiente capítulo se estudian procesos simples suficientemente conocidos en la literatura, que sirven como base para la inferencia de propiedades más específicas del método en cuanto a estabilidad y convergencia. La existencia de soluciones analíticas para estos problemas permite la comparación de éstas con las obtenidas por el método integral y los esquemas habituales en diferencias. En concreto, se tratan problemas de marcado carácter no markoviano, así como procesos en los que la media y la varianza de f permanecen constantes en el tiempo, dada su estrecha relación con las propiedades conservativas en procesos físicos, descritos por ecuaciones tipo Fokker-Planck en la Física Estadística.

2.3.2 Discretización espacial.

A diferencia del método analítico para la resolución de la EFP denominado *Path Integral* en la literatura, en el que las K integrales relacionadas iterativamente en (2.26) han de resolverse analíticamente, procediendo posteriormente al límite $K \rightarrow \infty$, con $K\tau$ constante, para derivar $f(q, t)$, el método integral supone únicamente la implementación de f en el sentido de los esquemas explícitos en diferencias. El esquema de avance temporal (2.26) implica la integración sobre las variables q' que, generalmente, no podrá llevarse a cabo de forma analítica. Por esta razón la integral de evolución ha de resolverse mediante procedimientos numéricos acordes con las características de la misma. En principio cabe esperar que dicha integral puede ser resuelta siguiendo cualquiera de los métodos de integración numérica conocidos en la literatura, sin embargo, la probabilidad de transición a tiempos cortos P_τ se asemeja analíticamente a una función δ de Dirac, por lo cual presentará un máximo pronunciado en $q = q'$. Este hecho sugiere que la integración numérica para implementar f^n ha de realizarse mediante procedimientos distintos a los habituales. Como ejemplo, para el caso unidimensional, puede considerarse la integración mediante la Regla Extendida del Medio Punto, cuando Δq representa el ancho de la red espacial discreta. Si τ es próximo a cero, (2.13) tendrá un máximo en $q = q' = q_i$ de valor proporcional a $1/\sqrt{\tau}$, sólo el término $f^n(q_i)\Delta q/\sqrt{4D(q_i, t_n)\tau}$ contribuirá en la integral numérica, por lo que f^{n+1} no coincidirá con f^n cuando τ tiende a cero para cualquier valor de la razón $(\Delta q)^2/\tau$. En este límite, el núcleo $Q_{ij} = P_\tau(q_i, q_j)\Delta q$ en la integración numérica por rectángulos no coincide con la función δ de Kronecker δ_{ij} , representación de $\delta(q - q')$ sobre la red discreta.

Así pues, la discretización espacial ha de ser coherente con el esquema de implementación temporal dado en (2.26). La integración numérica de ésta debe efectuarse de tal forma que el sentido físico contenido en la relación de consistencia (2.6) no se altere, lo que supone que, para cualquier valor razonable del incremento espacial de la red discreta Δq , la función f^{n+1} coincida con f^n a medida que el intervalo temporal τ tiende a cero. Esta pretensión se fundamenta esencialmente en el hecho de no desvirtuar, mediante la discretización espacial, las propiedades de estabilidad esperadas del esquema de avance en la variable t .

Resulta evidente que la integral sobre las variables espaciales en (2.26) dependerá de la representación discreta concedida a la función f^n en cada iteración temporal. Para ilustrar el procedimiento general se considera, con el fin de no sobrecargar la notación, el problema (2.25) unidimensional en la variable real q sobre el intervalo finito (a, b) . Definiendo la red discreta centrada de N puntos, que no contiene a los puntos frontera

$$q_i = a + \Delta q\left(i - \frac{1}{2}\right), \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad \Delta q = \frac{b - a}{N} \quad (2.27)$$

la función f , en el instante $t = n\tau$, se representa, en primera aproximación, mediante la densidad de distribución discreta dada por

$$f^n(q) = \sum_{i=1}^N f_i^n \delta(q - q_i) \Delta q \quad (2.28)$$

donde f_i^n representa a $f^n(q)$ evaluada en cada punto q_i de la red centrada. Esta representación propicia la inmediata resolución de (2.26), de la que se obtendrán los valores de

f_i^{n+1}

$$f^{n+1}(q_i) = \sum_j Q_{ij} f_j^n, \quad Q_{ij} = P_\tau(q_i, q_j | n\tau) \Delta q \quad (2.29)$$

donde $P_\tau(q, q' | t)$ se ha evaluado en $t = n\tau$ y $q = q_i$. Construyendo de nuevo la función $f^{n+1}(q)$ mediante el esquema (2.28) el proceso de iteración queda claramente establecido. El sencillo esquema anterior lleva implícito la invariabilidad de la constante de normalización de f_0 en cada iteración, siempre que P_τ se encuentre normalizada a la unidad sobre el intervalo (a, b) según (2.14).

Es obvio que (2.28) resuelve la integral de evolución para $f^n(q)$ hasta $f^{n+1}(q)$ conduciendo a una simple integración numérica por rectángulos. La relación (2.29) confiere a la función Q_{ij} un significado físico acorde con el problema continuo que representa. En términos de la probabilidad de transición a tiempos cortos, de la que se deriva Q_{ij} , ésta última puede interpretarse como la fracción de $f^n(q_i)$ que pasa a ocupar la posición $f^{n+1}(q_j)$ del plano definido por f y q , en el instante posterior $t_{n+1} = (n+1)\tau$; la normalización de P_τ

$$\sum_i P_\tau(q_i, q_j | t) \Delta q = \sum_i Q_{ij} = 1$$

asegura la completa redistribución de la densidad discreta (2.28) y, por tanto, la conservación de la norma inicial de f . No obstante, como se afirmó en los párrafos anteriores, si τ es pequeño, Q_{ij} se anula para $q_i \neq q_j$ y, para Δq fijo, $\lim_{\tau \rightarrow 0} Q_{ij} = M \Delta q \gg 1$, donde M representa el máximo de P_τ en $q_i = q_j$. Esta característica implica elegir el incremento espacial Δq en función de τ y de la constante M , de tal forma que $\lim_{\tau \rightarrow 0} Q_{ij} = \delta_{ij}$, lo que supone una cierta limitación en la aplicabilidad del método. El problema puede solventarse con la representación de la función f^n mediante una serie de ondas o pulsos rectangulares sustituyendo cada $\delta(q - q_i) \Delta q$ en (2.28) por la función $\xi(q_{i-\frac{1}{2}}, q, q_{i+\frac{1}{2}})$ definida por

$$\xi(A, x, B)_{(A < B)} = \begin{cases} 0 & \text{si } x < A \\ \frac{1}{B-A} & \text{si } A \leq x \leq B \\ 0 & \text{si } x > B. \end{cases} \quad (2.30)$$

Por tanto, conocida la condición inicial $f_0(q)$ se construye la función con discontinuidades simples

$$f^0(q) = \sum_{i=1}^N f_i^0 \xi(q_{i-\frac{1}{2}}, q, q_{i+\frac{1}{2}}) \Delta q \quad (2.31)$$

donde $q_{i \pm \frac{1}{2}}$ son los puntos de la red auxiliar de contorno

$$\begin{aligned} q_{i-\frac{1}{2}} &= q_i - \frac{1}{2} \Delta q, & q_{1-\frac{1}{2}} &= a, \\ q_{i+\frac{1}{2}} &= q_i + \frac{1}{2} \Delta q, & q_{N+\frac{1}{2}} &= b, \end{aligned} \quad (2.32)$$

y f_i^0 se hace coincidir con $f_0(q)$ evaluada en $q = q_i$. De forma más general, la función f^n puede reflejarse en la suma

$$f^n(q) = \sum_{i=1}^N \rho_i^n(q) \xi(q_{i-\frac{1}{2}}, q, q_{i+\frac{1}{2}}) \Delta q$$

donde $\rho_i^n(q)$ es un polinomio interpolante de la función $f^n(q)$ sobre el intervalo $[q_i - \Delta q/2, q_i + \Delta q/2]$. Por simplicidad, y con el fin de ilustrar el procedimiento a seguir, se ha tomado $\rho_i^n(q) = f^n(q_i)$ para construir la condición inicial n -ésima $f^n(q)$, necesaria en el cálculo de la integral de evolución. Con esta representación discretizada de la condición inicial para f , la función $f(q, \tau) = f^1(q)$ viene dada por aplicación directa de (2.26)

$$f^1(q_i) = \int_a^b P_\tau(q_i, q' | t=0) \sum_{j=1}^N f_j^0 \xi(q_{j-\frac{1}{2}}, q', q_{j+\frac{1}{2}}) \Delta q dq' = \sum_j Q_{ij}^0 f_j^0,$$

Se ha definido, en claro paralelismo con (2.28) para la nueva representación de f , la función Q_{ij}^0 - y por extensión Q_{ij}^n para $t = n\tau$ - como

$$Q_{ij}^n = \Delta q \int_{q_{j-\frac{1}{2}}}^{q_{j+\frac{1}{2}}} P_\tau(q_i, q' | n\tau) \xi(q_{j-\frac{1}{2}}, q', q_{j+\frac{1}{2}}) dq', \quad (2.33)$$

en $n = 0$. El núcleo de la integral anterior depende implícitamente de los coeficientes de difusión y deriva D y A , o más generalmente, de las funciones α y β dadas por (2.21), evaluadas en q' , al encontrarse éstas como parámetros en el propagador P_τ . No obstante, si tanto $\alpha(q', t)$ como $\beta(q', t)$ se sustituyen por sus valores en los puntos $q' = q_j$ de la red intermedia, la integración puede efectuarse sobre la variable q' ya que, habitualmente, P_τ depende en forma exponencial de la diferencia $q - q'$. En particular, para problemas definidos sobre toda recta real, si los extremos de la red discreta a y b se eligen suficientemente grandes como para anular $f^n(a)$ y $f^n(b)$, si para P_τ se toma la distribución gaussiana (2.13), se tiene

$$Q_{ij}^n = \frac{1}{2} \left\{ \text{fer} \left[\frac{u + \Delta q/2}{\sqrt{4\tau D_j}} \right] - \text{fer} \left[\frac{u - \Delta q/2}{\sqrt{4\tau D_j}} \right] \right\}, \quad u = q_i - q_j - \tau A_j \quad (2.34)$$

donde fer es la *función error*. La función Q_{ij}^n de (2.34) se encuentra acotada entre 0 y δ_{ij} para cualquier par de valores de q_i y q_j . Así mismo, al igual que P_τ , Q_{ij} se mantiene siempre positiva, reduciéndose a la función δ de Kronecker en el límite $\tau \rightarrow 0$, con independencia de la razón $\Delta q/\tau$. En este límite la suma sobre j para el avance de f^{n+1} se reduce a un solo término ($f_i^{n+1} = \sum \delta_{ij} f_j^n = f_i^n$), es decir, f^n permanece constante. El problema suscitado en la integración por rectángulos para la representación (2.28), queda así resuelto. La normalización de P_τ , por su parte, conlleva la correspondiente normalización a la unidad de Q_{ij}^n y el esquema numérico definitivo

$$f^{n+1}(q_i) = \sum_{j=1}^N Q_{ij}^n f_j^n, \quad \sum_i Q_{ij}^n = 1, \quad \lim_{\tau \rightarrow 0} Q_{ij}^n = \delta_{ij}, \quad (2.35)$$

se ajusta a las características físicas del problema continuo.

Cuando el esquema anterior se representa matricialmente por

$$\mathbf{f}^{n+1} = \mathbf{Q}^n \mathbf{f}^n, \quad \mathbf{f}^n = (f_1^n, f_2^n, \dots, f_N^n), \quad (2.36)$$

los términos Q_{ij} se interpretan como los elementos de la matriz $N \times N$ de avance temporal o de transición \mathbf{Q} equivalente, en el problema discreto, al operador integral $\mathcal{U}_{t,t'}$ del formalismo preliminar aducido como fundamento teórico del método. Tomando de nuevo como

referencia la probabilidad de transición a tiempos cortos dada por (2.13), es patente que la matriz de evolución \mathcal{Q} tendrá un gran número de elementos nulos, ya que éstos decaen exponencialmente según $\exp[-(q_i - q_j)^2 / (4D_j\tau)]$. En consecuencia, \mathcal{Q} se reduce a una matriz M -diagonal, ya que sólo serán apreciablemente diferentes de cero aquellos elementos para los cuales, en función de τ , la diferencia entre q_i y q_j sea menor que una cierta constante $2C_q$. La elección de $2C_q$ para cada valor del incremento temporal elegido, tras un análisis estimativo del comportamiento de los coeficientes A_j y D_j , reducen (2.35) a $2M + 1$ sumandos sobre el índice j , si M representa la parte entera de C_q . El valor de M puede darse a priori, conocida la probabilidad de transición a tiempos cortos, fijando τ de forma que la probabilidad de paso desde la posición q' a q se aproxime a la unidad tanto como se desee. Inversamente, si se fija un valor máximo de la diferencia $|q - q'|$ limitado por $M\Delta q$, la condición sobre la probabilidad da el valor máximo de τ . Una vez fijada la constante M en el primer paso temporal, o en cada iteración si fuera necesario, el esquema numérico global resulta totalmente explícito y, formalmente, equivale a un esquema en diferencias en el que las derivadas espaciales de aproximarán a $2M$ puntos de la red discreta.

En contraposición a estos últimos métodos, el planteamiento integral (2.35) se fundamenta en la naturaleza probabilística del problema continuo que representa, le confiere una clara interpretación física y le proporciona propiedades de estabilidad y convergencia que suponen una notable optimización sobre cualquier esquema en diferencias. De hecho, en todos los casos analizados el método integral numérico resulta tan eficiente como los esquemas implícitos en diferencias más solventes.

El modelo de avance temporal a través de probabilidades de transición ha sido utilizado por otros investigadores que obtienen el propagador simulando físicamente los procesos dispersivos descritos por la ecuación diferencial; pueden consultarse las referencias [10] y [11], en las que se propone una solución integral para la ecuación de Boltzmann. En todos los trabajos consultados los autores coinciden en destacar que el procedimiento numérico integral reduce el tiempo de computación, al poder tomar pasos temporales mayores que los esquemas explícitos en diferencias finitas.

2.4 Tratamiento de cantidades conservadas.

La representación definitiva del esquema numérico integral se sintetiza en el conjunto de relaciones (2.35). Sin embargo, las funciones Q_{ij}^n , procedentes de la integración sobre el intervalo $[q_i - \Delta q/2, q_i + \Delta q/2]$ de $P_\tau(q_i, q'|t)$, no obedecen unívocamente a la forma atribuida por (2.34), ya que el efecto de tal integración sobre los coeficientes $A(q')$ y $D(q')$ se ha recogido reemplazando éstos por sus valores en $q' = q_j$. El modelo de integral analítica que genera los elementos Q_{ij} no es único y por consiguiente, la definición de tal integral ofrece cierta flexibilidad que puede limitarse atendiendo a las características del problema físico general. En concreto, si el operador L_{FP} conlleva la existencia de ciertas magnitudes conservadas (momento, energía ...), A_j y D_j , que sintetizan el efecto de la integral anterior sobre A y D , se determinarán de tal forma que, en el problema discreto, estas magnitudes se mantengan constantes en la evolución. Cabe esperar, por tanto, que de las propiedades conservativas del operador L_{FP} se desprendan los coeficientes Q_{ij} apropiados sobre los que añadir, además de la condición de normalización, las nuevas condiciones para el man-

tenimiento de las magnitudes conservadas. Esencialmente, las propiedades de conservación atribuidas al operador de Fokker-Planck son consecuencia de la dependencia funcional en la variable q de los coeficientes de difusión y deriva. Así pues, la elección de la matriz de evolución apropiada para cada problema, se halla también condicionada por la forma del propagador a tiempos cortos P_τ que proviene, en gran medida de las funciones auxiliares tomadas en la factorización (2.21). En definitiva, los grados de libertad implícitos en el método integral numérico favorecen la correcta adaptación al problema continuo. Consecuentemente, es posible derivar un modelo para implementar f , mediante la corrección de la matriz Q por dos vías diferentes :

2.4.1 la reforma de P_τ , dado el carácter finito del incremento temporal τ en el esquema numérico y

2.4.2 la redefinición de la integral que genera los elementos Q_{ij}^n , contando con los efectos de la discretización espacial.

2.4.1 Corrección sobre P_τ .

De forma general, la conservación del momento y la energía de un sistema físico de naturaleza estocástica se relacionan directamente con el mantenimiento de la media $\langle q \rangle$ y varianza $\langle (q - \langle q \rangle)^2 \rangle$ de q , en concordancia con la orientación probabilística concedida en el tratamiento generado a lo largo de la exposición. Así, si tanto f^5 como la corriente de probabilidad $J_q = Af - \partial Df / \partial q$, se anulan sobre los extremos del intervalo (a, b) , las variaciones temporales de los momentos $\langle q \rangle(t)$ y $\langle q^2 \rangle(t)$ dadas por las relaciones

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle q \rangle(t) &= \int_a^b q \frac{\partial f}{\partial t} dq = \int_a^b A(q, t) f(q, t) dq \\ \frac{d}{dt} \langle q^2 \rangle(t) &= \int_a^b q^2 \frac{\partial f}{\partial t} dq = 2 \int_a^b [D(q, t) + qA(q, t)] f(q, t) dq \end{aligned} \quad (2.37)$$

han de anularse para todo t . De igual forma, para los momentos $\bar{q}(q', t)$ y $\bar{q}^2(q', t)$ de la probabilidad de transición, se verifican las relaciones (2.37) si f es sustituida por P_τ . Así, a primer orden en τ , de acuerdo con la aproximación temporal de (2.24), las expresiones para los momentos de f se reescriben como

$$\begin{aligned} \langle q \rangle(t + \tau) &= \langle q \rangle(t) + \tau \langle A \rangle(t) + O_1(\tau^2) \\ \langle q^2 \rangle(t + \tau) &= \langle q^2 \rangle(t) + 2\tau \langle D + qA \rangle(t) + O_2(\tau^2), \end{aligned} \quad (2.38)$$

⁵para no sobrecargar la exposición se ha supuesto $f(q, t) = 0$ en $q = a$ y $q = b$; de forma más general habría de contarse con la expresión

$$\frac{d}{dt} \langle h(q, t) \rangle(t) = \left\langle \frac{\partial h}{\partial t} + A \frac{\partial h}{\partial q} + D \frac{\partial^2 h}{\partial q^2} \right\rangle - \int_{q=a}^{q=b} d \left[\frac{\partial h}{\partial q} D f \right]$$

si $h(q, t)$ es una cantidad conservada del problema

y sustituyendo $f(q, t + \tau)$ en $\langle q \rangle(t + \tau)$ por la ecuación integral de avance temporal, tras intercambiar el orden de integración, se tiene

$$\langle q \rangle(t + \tau) = \int_a^b \bar{q}(q', t + \tau) f(q', t) dq'$$

donde $\bar{q}(q', t + \tau)$ representa la media de q sobre la probabilidad de transición a tiempos cortos, y cuyo valor es

$$\bar{q}(q', t + \tau) = \tau A(q', t) + q' + R_1(q', \tau^2), \quad (2.39)$$

en virtud de la propiedad (2.15) a primer orden en τ . Procediendo de igual modo para $\langle q^2 \rangle(t + \tau)$ en función de $\bar{q}^2(q', t + \tau)$

$$\langle q^2 \rangle(t + \tau) = \int_a^b \bar{q}^2(q', t + \tau) f(q', t) dq'$$

donde, según (2.16), hasta segundo orden de potencias en τ

$$\bar{q}^2(q', t + \tau) = 2\tau[D(q', t) + q'A(q', t)] + q'^2 + R_2(q', \tau^2). \quad (2.40)$$

Las expresiones de los restos R_1 y R_2 son conocidas una vez fijada la probabilidad de transición. Así, para la distribución gaussiana (2.13) la media y la varianza son $q' + \tau A(q', t)$ y $4\tau D(q', t)$ respectivamente por lo que R_1 es idénticamente nulo, mientras que R_2 es $\tau^2 A$. Si el propagador P_τ se elige de tal forma que las integrales de $R_1 f(q', t)$ y de $R_2 f(q', t)$, esto es $\langle R_1 \rangle$ y $\langle R_2 \rangle$, se anulen, las igualdades (2.38) se verifican exactamente sin los restos O_1 y O_2 en orden τ^2 . Cuando el problema continuo es tal que los dos primeros momentos de f se mantienen constantes en el tiempo, $\langle q \rangle(t + \tau)$ y $\langle q^2 \rangle(t + \tau)$ coinciden exactamente con sus valores en el instante t , con independencia del valor de τ . Si esta elección no fuera posible, como ocurre en el ejemplo mencionado al ser $\langle A^2 \rangle$ diferente de cero, puede procederse a la redefinición de la probabilidad de transición de forma que R_1 y R_2 no aparezcan en los momentos $\bar{q}(q', t + \tau)$ y $\bar{q}^2(q', t + \tau)$ o, al menos, resulten proporcionales a las tasas de variación temporal dadas en (2.37).

En la mayoría de los casos estudiados, la condición anterior sobre los momentos de P_τ se consigue fácilmente mediante la introducción de un término corrector de orden τ^2 en la desviación típica σ^2 de ésta. Para el caso particular que ilustra esta sección, es decir, si P_τ coincide con la gaussiana (2.13) unidimensional, $2\sigma^2$ se identifica con $4D(q', t)\tau$ por lo que O_1 y O_2 se anularán si $2\sigma^2$ se cambia por $4D\tau(1 - \tau\langle A^2 \rangle/2\langle D \rangle)$, entre otras posibilidades. La corrección introducida en P_τ convierte así al operador integral $\mathcal{U}_{t+\tau, t}$ en un operador que conserva la norma inicial de f y los momentos de primer y segundo orden en cada iteración temporal. Debe notarse que estos términos correctivos son a segundo orden en τ y que su inclusión en P_τ efectuada a posteriori sobre el propagador original a tiempos cortos, no incumple ninguna de las propiedades satisfechas por éste en el límite $\tau \rightarrow 0$, por lo que el problema de la evolución temporal no queda desvirtuado. En consecuencia, se ha de tener presente que tales correcciones no pueden involucrar términos de orden menor que τ^2 : la inclusión de los mismos no conduciría a los momentos correctos A y D , lo que supondría la alteración del problema original. Este rasgo viene a subrayar la importancia aludida en

la sección anterior sobre la necesidad de que P_τ reproduzca realmente los coeficientes del desarrollo de Kramers-Moyal. Afortunadamente, si la EFP continua de (2.25) encierra en sí misma las propiedades conservativas referenciadas, los parámetros correctivos serán siempre de orden τ^m con $m \geq 2$, mientras que P_τ seguirá siendo válida hasta segundo orden en el incremento temporal.

2.4.2 Corrección de Q_{ij}^n . Función de Autocorrelación Numérica.

El procedimiento descrito, orientado hacia el diseño de un esquema para implementar f en el tiempo, coherente con las propiedades conservativas del operador L_{FP} , afecta únicamente a la discretización de la variable t . Es probable, por tanto, que en la resolución numérica de la integral espacial, necesaria para la operatividad del método, las características del operador integral se vean alteradas por efectos de discretización en la variable espacial. De forma más general, resulta necesario recurrir directamente a la modificación de P_τ , siempre a segundo orden en τ , una vez establecido el procedimiento generador de los elementos Q_{ij}^n en la matriz de evolución. Adoptando la representación de $f^n(q)$ mediante una función con un número finito de discontinuidades simples (2.31), el efecto de la integral (2.33) en $t_n = n\tau$ sobre los coeficientes de difusión y convección, puede recogerse mediante la representación formal de los mismos a través de las relaciones

$$\begin{aligned} A(q', t) &= A(q_j, t) + \epsilon_1(t) A(q_j, t) = (1 + \epsilon_1) A_j \\ D(q', t) &= D(q_j, t) + \epsilon_2(t) D(q_j, t) = (1 + \epsilon_2) D_j \end{aligned} \quad (2.41)$$

donde, ϵ_1 y ϵ_2 son independientes de q , y han de ser tales que

$$A_{j-1} \leq (1 + \epsilon_1) A_j \leq A_{j+1} \quad \text{y} \quad D_{j-1} \leq (1 + \epsilon_2) D_j \leq D_{j+1}.$$

El ajuste de las funciones ϵ se hará de tal forma que las relaciones (2.39) y (2.40) generen funciones $R_1(q_j, t_n)$ y $R_2(q_j, t_n)$ nulas o proporcionales a $\langle A \rangle$ y/o $\langle [D + qA] \rangle$, que han de anularse si se conservan los dos primeros momentos de la distribución f . Dado que, habitualmente $\bar{q}^2(q', t)$ depende de $A(q', t)$ a través de $\bar{q}(q', t)$, el ajuste de las magnitudes conservadas puede cargarse sólo sobre una de las funciones ϵ , en particular sobre $\epsilon_1(t)$ que se notará en lo sucesivo por $\epsilon(t)$. Como para cualquier valor de ϵ cabe esperar que la integral en $\bar{q}(q', t) - q'$, y su correspondiente discretización

$$\sum_i q_i Q_{ij}^n - q_j$$

sea proporcional a la función $A(q_j, t_n)$, o más concretamente a ϵA_j , el momento de primer orden de f^{n+1} en $(n+1)\tau$ $\langle q \rangle_{n+1}$ coincidirá con $\langle q \rangle_n$ ya que la suma $\sum_j f_j^n A_j$ es nula, en concordancia con la relación entre $\langle q \rangle(t+\tau)$ y $\langle q \rangle(t)$. Por lo tanto, la condición que ha de satisfacer la función de ajuste ϵ se desprenderá únicamente de

$$\begin{aligned} \bar{q}^2(q_j, t) &= \sum_i q_i Q_{ij}^n = q_j^2 + 2\tau[D_j + q_j A_j] + R(\epsilon|q_j, t_n) \\ \text{si} \quad \sum_j R(\epsilon|q_j, t_n) f_j^n \Delta q &= 0. \end{aligned} \quad (2.42)$$

De este modo se consigue que $\langle q^2 \rangle_{n+1}$ coincida con $\langle q^2 \rangle_n$. Sin embargo $\epsilon(t_n)$ no puede explicitarse desde (2.42) para cualquier forma de los elementos de la matriz de transición Q , aunque analíticamente sí sea posible, como se mostró en párrafos anteriores para (2.13). El procedimiento a seguir para anular o minimizar la serie anterior ha de ser, por consiguiente, de índole numérica, ya que las integrales para el cálculo de los momentos de f y P_τ se han llevado a cabo numéricamente a partir de la definición de las tasas Q_{ij}^n . Por esta razón se aconseja proceder a un ajuste iterativo de la función ϵ a lo largo del proceso de implementación de f , equivalente a resolver la ecuación (2.42) por medio de aproximaciones sucesivas que supongan la minimización del resto $R_j f_j^n$.

Una solución simple para la ecuación en $\epsilon(t_n) = \epsilon_n$ se establece notando que, según la propia definición de R_j , (2.42) puede reescribirse como

$$\langle q^2 \rangle_{n+1} - \langle q^2 \rangle_n = \sum R_j f_j^n \Delta q$$

y asumiendo que el resto R_j es proporcional a ϵ_n , esta suma dependerá en cada iteración de la diferencia entre T_{n+1} y T_n , si T representa el momento $\langle q^2 \rangle$. En definitiva se tiene

$$\epsilon_{n+1} = C_n (T_{n+1} - T_n),$$

donde C_n es una constante de proporcionalidad distinta de cero, procedente de la suma $\sum R_j f_j^n$. De forma equivalente, la relación $\epsilon_{n+1} = \epsilon_n + C_{n-1} (T_n - T_{n-1})$, fija la fórmula recursiva que conduce, tras un cierto número de iteraciones, al valor definitiva de ϵ . Si el sistema en estudio es conservativo, la diferencia $T_{n+1} - T_n$, será de orden τ^2 , la corrección no supondrá una alteración de las características del sistema. En este caso, partiendo de la condición inicial f_0 que define el momento T_0 , bastará fijar una constante C_0 , para que la relación recursiva

$$\epsilon_{n+1} = \epsilon_n + C_0 (T_n - T_0), \quad (2.43)$$

establezca en cada iteración el valor de ϵ que minimiza la posible diferencia entre T_n y T_0 . La constante C_0 es un parámetro fijo durante todo el proceso iterativo, puede darse arbitrariamente, si bien existe la posibilidad de dar una estimación de su valor analizando la variación $T_1 - T_0$ en la primera iteración, lo que permitirá además, inferir el primer término ϵ_1 de la sucesión. Por lo general, es suficiente tomar $\epsilon_1 = 0$ y $C_0 \neq 0$, y dejar evolucionar (2.43) hasta que las características propias del sistema restablezcan el término constante ϵ , con absoluta independencia de la forma elegida para los elementos de Q_{ij}^n de la matriz de transición.

El cambio de A_j , por $(1 + \epsilon_n)A_j$, o más generalmente, por $(1 + \epsilon_n)\alpha(q_j, t)$, en $\alpha(q', t)$ definida por (2.21), ha de conducir a un esquema numérico en el que se mantengan constantes la media y la varianza de la distribución, si el problema continuo presenta esta propiedad. Es interesante destacar que, si se pretende aplicar el ajuste anterior a sistemas en los que $T(t)$ no permanece constante, el parámetro ϵ_n diverge, ya que la diferencia entre T_n y T_0 , no cambia de signo durante un elevado número de iteraciones. Así pues, si se pretende forzar tales sistemas mediante la corrección en A_j la variación incontrolada de ϵ_n conduce inevitablemente a una solución numérica errónea f_n . Este hecho genera confianza respecto a la aplicabilidad general del modelo, como cabría esperar, ya que, según se afirmó, el parámetro de autocorrección sólo puede introducir términos en τ^2 ; si no sucede así P_τ deja de

ser válida para implementar f_n , al no recrear los momentos A y D correctos para el problema que representa. En problemas para los que (2.43) sea aplicable, la función $\Psi_n = 1 + \epsilon_n$ oscila en torno a $\Psi = 1$; la amplitud de la oscilación se amortigua durante el proceso de iterativo, fijándose en un valor próximo a la unidad. Simultáneamente la razón T_n/T_0 oscila también respecto a unidad, identificándose con ésta cuando Ψ se estabiliza. Dado que Ψ_n , en cierto modo, correlaciona los términos T_n y $T(t) = T_0$ con el fin de reconducir la evolución de forma físicamente coherente con solución continua $f(q, t)$, se la ha denominado *función de autocorrelación numérica* para el método numérico integral. Interesa subrayar que Ψ es la solución de la ecuación (2.43), en la que se cuenta con el modelo de discretización espacial. La función de autocorrelación es plenamente coherente con el esquema discreto, de modo que en la corrección de T_n se integran los efectos de adecuación a las características de la red espacial discreta. El ajuste recursivo de Ψ_n no sólo implica la minimización de la diferencia entre T_n y T_{n-1} , también limita simultáneamente, la propagación de posibles errores de redondeo implícitos en la naturaleza numérica de la solución en f .

La operatividad de la función de autocorrelación Ψ puede extenderse sobre aquellos problemas en los que, a pesar de no mantenerse constante el momento $T(t)$ (y/o $\langle q \rangle$), es posible conocer la ley de evolución de $T(t) = \langle q^2 \rangle(t)$ por integración directa de las ecuaciones diferenciales de (2.37.) A la vista de (2.43) si T_0 se identifica con $T(t)$, la generalización de la fórmula recursiva para Ψ es inmediata, esto es

$$\Psi_{n+1} = \Psi_n + C_0 (T_n - T(t)), \quad (2.44)$$

donde T_n oscilará ahora en torno a la función $T(t)$ coincidiendo con ésta tras cierto número de iteraciones.

No ha de pensarse que la aplicación de Ψ_n al modelo de integración numérica es una condición necesaria para la estabilidad de la solución final, ya que, como se ha afirmado, el método resulta habitualmente estable en sí mismo. El papel desempeñado por la función de autocorrelación se limita simplemente a minimizar la diferencia entre los momentos reales de las soluciones analítica y numérica, lo que en último extremo representa sólo la optimización del modelo en vías de mejorar, posiblemente, la convergencia. Los resultados anteriores son fácilmente extensibles al caso $N - dimensional$ para la función de distribución $f(q, t)$.

La combinación de los dos procedimientos de ajuste, esto es, la inclusión de términos correctivos en la expresión analítica de P_τ , y el concurso de la función de autocorrelación, propicia la rápida convergencia de Ψ a su valor estacionario. Sin embargo basta aplicar el último procedimiento, de carácter más general en el que se contabilizan todos los efectos de las discretizaciones. En los problemas sin cantidades conservadas es suficiente, si se desea, introducir la corrección a segundo orden en τ sobre la desviación típica de la función P_τ elegida, si bien esta modificación no resulta necesaria ya que el incremento temporal se supone lo suficientemente pequeño.

2.5 Consistencia y estabilidad.

En paralelismo con los esquemas en diferencias, se plantea en esta sección el estudio de la *consistencia* del método numérico desarrollado en el presente capítulo. La propiedad de la consistencia hace mención al hecho de que el esquema discreto en cuestión, en los

límites $\tau \rightarrow 0$ y $\Delta q \rightarrow 0$, reproduce exactamente la ecuación de Fokker-Planck tratada y no otra. Como el esquema de avance temporal es independiente del modelo de discretización en las variables espaciales, se procederá primero a mostrar la consistencia del esquema (2.26). En primer lugar conviene probar que la ecuación integral de evolución es equivalente a la ecuación diferencial problema. Tomando como referencia el modelo de cálculo para la probabilidad de transición a tiempos cortos de la sección 2.2.2, la ecuación

$$f(q, t_n + \tau) = \int_{\mathcal{D}} P_\tau(q, q' | t_n) f(q', t_n) dq',$$

debe conducir a la ecuación original (2.25). Basta considerar la ecuación diferencial de la que se obtiene P_τ , dada por (2.24), reescrita a primer orden en τ como

$$P_\tau = (1 + \tau \mathbf{L}_{FP}^* + O(\tau^2)) \delta(q - q') = (1 + \tau \mathbf{L}_{FP} + O_1(\tau^2)) \delta(q - q') \quad (2.45)$$

que sustituida en (2.45) da

$$f(q, t + \tau) = f(q, t) - \tau \frac{\partial}{\partial q} \left\{ \int A(q, t) f^n \delta(q - q') dq' - \frac{\partial}{\partial q} D(q, t) f^n \delta(q - q') dq' \right\} + O(\tau^2),$$

donde se ha recuperado la forma original de los coeficientes de difusión y deriva, partiendo de las factorizaciones (2.21), tras proceder de forma inversa a la efectuada para definirlos. Si se lleva a cabo la integración sobre la variable q' y se procede al límite $\tau \rightarrow 0$ con $n\tau = t$ se tiene

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{f(q, t + \tau) - f(q, t)}{\tau} = \mathbf{L}_{FP}(q, t) f(q, t) + \lim_{\tau \rightarrow 0} O(\tau^2)$$

cuyo primer miembro es precisamente la derivada temporal de $f(q, t)$. El resto $O(\tau^2)$ se anula en el límite anterior, ya que dicha función es proporcional a τ como puede verificarse atendiendo a la serie de Dyson, sección 2.1, para la solución formal de la ecuación de Fokker-Planck en la probabilidad de transición. La derivación analítica anterior es independiente de la dependencia temporal de las funciones A y D , aun cuando esta dependencia pueda estar generada por la relación directa de ambas con la propia función de distribución f .

Comprobada la equivalencia entre las ecuaciones para el movimiento de f en las formas integral y diferencial, para verificar la consistencia del modelo numérico es necesario evaluar el error global de truncamiento tras M iteraciones. En este caso, el error de truncamiento depende de la relación entre la probabilidad de transición aproximada P_τ y el propagador verdadero $\Pi = P(q, t + \tau | q', t)$ válido para cualquier τ y cuya forma se desconoce. La estimación del error global se hará tras la evaluación del error local de truncamiento cometido en cada paso, esto es, si $f^n(q)$ indica la aproximación numérica de f en la n -ésima iteración, y $f_n(q)$ denota la función real f evaluada en $t = n\tau$, tal error vendrá dado por

$$f^n(q) - f_n(q) = \int P_\tau(q, q' | t) f^{n-1}(q') dq' - \int P(q, t + \tau | q', t) f_{n-1}(q') dq'. \quad (2.46)$$

En general, la diferencia anterior origina una función $O(q|\tau^2)$, que representa un infinitésimo a segundo orden en τ . El análisis de la propagación de dicho error, dado el carácter finito del paso temporal τ , depende de la relación funcional de A y D con el tiempo $t_n = n\tau$. Como A y D pueden depender de la función f , el problema general relativo a la estimación del error es difícil de solventar. En cambio, para una ecuación de Fokker-Planck en la que los coeficientes de convección y difusión sean independientes de t , resulta sencillo determinar el orden del error, ya que P_τ y P dependen sólo de τ , según (2.12) para los operadores $L_{FP}^*(q, q')$ y $L_{FP}(q)$. En la primera iteración (2.46) se traduce en

$$f^1 - f_1 = \int \{e^\tau L_{FP}^*(q, q') - e^\tau L_{FP}(q)\} \delta(q - q') f_0(q') dq'$$

y dado que $L_{FP}^* \delta = L_{FP} \delta$,

$$f^1 - f_1 = \frac{1}{2} \tau^2 \int [L_{FP}^* - L_{FP}] L_{FP} \delta(q - q') f_0(q') dq' + O(\tau^3) = O_1(q|\tau^2)$$

donde la función $O_1(\tau^2)$ representa una función de orden τ^2 . La aplicación de la ley recursiva (2.46) permite estimar el error local de truncamiento en la n -ésima iteración, dependiente del resto $O_{n-1}(\tau^2)$, esto es

$$f^{n+1} - f_{n+1} = O_{n-1}(\tau^2) + O_n(\tau^2).$$

Si el intervalo es estudio $[0, t]$ se divide en M subintervalos de anchura $\tau = t/M$, suponiendo acumulativo el error generado en cada paso, el error global de truncamiento será de orden τ , es decir

$$f^{n+1} - f_{n+1} = f^{n+1} - \int P f(q', n\tau) dq' = O(\tau). \quad (2.47)$$

Cada integral de (2.9) es válida hasta orden $1/M^2$, siendo el proceso global válido hasta orden $1/M$, siempre en el caso más desfavorable. Sin embargo, como el error local depende de la diferencia entre el operador auxiliar L_{FP}^* y el operador real L_{FP} , la adecuación del primero a cada problema particular puede originar que la función $O_n(q|\tau^2)$ se reduzca notablemente, al menos en un cierto subintervalo del recorrido de f . A efectos prácticos, la optimización del método es factible siempre que en el operador auxiliar, esto es, en la representación δ , se recojan los comportamientos del operador original en puntos singulares. De hecho, en todos los casos estudiados el error de truncamiento global resulta más próximo a un infinitésimo de segundo orden en τ que a $O(\tau)$. Procediendo al límite $\tau \rightarrow 0$ en la expresión del error de truncamiento (2.47) es obvio que el esquema discreto se reduce a la ecuación integral de evolución (2.9), donde P_τ se cambia por $P(q, t + \tau|q', t)$, lo que prueba la consistencia del modelo.

En el caso de A y D dependientes del tiempo, incluyendo la posibilidad de la dependencia en $f(q, t)$, el error global puede considerarse analíticamente también de orden τ , si este parámetro se considera infinitesimal. La propagación del error a lo largo del proceso iterativo no puede estimarse para el caso general debido a la incertidumbre generada por la posible alinealidad. Sin embargo, los razonamientos anteriores se extienden fácilmente a estos casos bajo ciertas condiciones. En concreto, si los coeficientes de difusión y deriva son tales

que varían lentamente con el tiempo, éstos pueden suponerse constantes en el subintervalo $[t, t + \tau]$ para proceder de forma análoga a la presentada en el párrafo anterior. En este caso, cabe esperar que las conclusiones derivadas para A y D independientes de t sean extensibles a estos problemas. La valoración de la evolución temporal para estos coeficientes conducirá a la apropiada elección del paso finito τ . Para problemas en los que existe solución estacionaria puede estimarse el tiempo de relajación T del sistema, esto es, la medida del tiempo que tarda f en aproximarse a la solución estacionaria, y proceder a dividir el intervalo $[0, T]$ en M subintervalos de longitud τ , en el que los momentos $A(q, t)$ y $D(q, t)$ no varíen sustancialmente. De esta forma, P_τ seguirá contando en sí misma con la representación adecuada de A y D para τ finito.

En definitiva, cualquiera que sea el modelo elegido para representar P_τ en el límite $\tau \rightarrow 0$ se reproduce la ecuación del problema continuo. Nuevamente, el requisito de que P_τ sea tal que de ella se desprendan exactamente los momentos A y D se hace necesario para que el esquema numérico resulte consistente. El procedimiento seguido para el cálculo del propagador a tiempos cortos en la sección 2.2.2 supone, pues, la consistencia del modelo.

Cuando se cuenta con la discretización espacial, el esquema de integración elegido ha de conducir en el límite $\Delta q \rightarrow 0$ a la ecuación integral de evolución (2.6), consistente con la ecuación diferencial problema. En particular, si $f(q, t)$ se representa mediante la serie (2.31) las identidades

$$\lim_{\Delta q \rightarrow 0} \xi(q_i - \Delta q/2, q', q_i + \Delta q) = \delta(q_i - q')$$

y

$$\int_{q_j - \frac{1}{2}}^{q_j + \frac{1}{2}} P_\tau(q, q'|t) \Delta q' = P_\tau(q, q_j|t) \Delta q' + O(\Delta q'^3)$$

permiten evaluar el límite

$$L = \lim_{\Delta q \rightarrow 0} \sum_{j=1}^N Q_{ij}^n f(q_j, t_n).$$

Dado que las sustituciones $q_j \rightarrow q'$, $q_i \rightarrow q$ y $\sum_j \Delta q \rightarrow \int dq'$ ($N \rightarrow \infty$) reflejan el proceso al límite del caso discreto al continuo, se tiene

$$L = \int_a^b f(q', t_n) P_\tau(q, q'|t_n) dq'$$

que es exactamente la ecuación integral de evolución (2.9), cuya consistencia con la EFP se ha probado anteriormente. Realmente, la reducción de (2.33) a la ecuación integral de avance temporal, depende únicamente de la forma de representar $f^n(q')$ mediante suma de funciones con discontinuidades simples, en términos de funciones $\xi(q_i - \Delta q/2, q', q_i + \Delta q)$, con la red auxiliar de contorno (2.32). Como esta representación es arbitraria -incluso puede no ser necesaria si la integral (2.9) es resoluble analíticamente- la consistencia del esquema numérico queda a expensas del procedimiento utilizado para construir, en cada iteración temporal, la condición inicial n -ésima $f(q', n\tau)$.

La función de autocorrelación numérica Ψ , en problemas con magnitudes conservadas, no contribuye a alterar las propiedades de consistencia. Ya que $\Psi_{n+1} = \Psi(t_n + \tau)$ y $\Psi_n = \Psi(t_n)$

se relacionan, en virtud de (2.44) por

$$\frac{\Psi_{n+1} - \Psi_n}{\tau} = C_0 \frac{(T_n - T_{n-1})}{\tau};$$

si se procede al límite $\tau \rightarrow 0$, dado que $dT(t)/dt = 0$,

$$\frac{d\Psi}{dt} = C_0 \frac{dT}{dt} = 0.$$

Así pues, el valor inicial $\Psi_0 = 1$ se mantendrá constante en toda la evolución, lo que implica la independencia de Q_{ij}^n en el parámetro de ajuste Ψ , cuando el incremento temporal tiende a cero.

Otra propiedad importante para el estudio de las características generales del procedimiento integral es su estabilidad. La estabilidad de un método numérico consiste en probar que existe un límite superior, a medida que el incremento temporal tiende a cero, que marca la máxima amplificación posible de toda la información contenida en la condición inicial. Como condición inicial en este caso, no ha de entenderse sólo $f_0(q)$, sino que es preciso contar con toda la información dada en la formulación general del problema. Las condiciones de contorno, el carácter positivo de la función de distribución y el mantenimiento de la norma, entre otras propiedades, deben contarse como parte de la información inicial, cuyo rango de variabilidad se intenta acotar. Para el esquema integral en el que se dispone únicamente de la discretización temporal, es obvio que tal límite en la amplificación de la información existe, ya que, en virtud de la propiedad

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} P_\tau(q|q', t) = \delta(q - q'),$$

a medida que τ se aproxima a cero, la función $f^{n+1}(q) = f(q, t + \tau)$ tiende a $f(q, t)$, donde se sintetiza toda la información del problema. Así mismo, para el esquema numérico global (2.35), las funciones positivas Q_{ij}^n , que representan la matriz de transición en (2.36), se encuentran acotadas superiormente por la unidad, con independencia de los valores de A_j y D_{ij} y de cualquier valor concedido a τ y Δq . Esta propiedad está esencialmente implícita en la definición de Q_{ij} . En el caso particular en el que Q_{ij} se define por (2.34) como diferencia de funciones error, es sencillo mostrar las propiedades

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N Q_{ij}^n &= 1 \\ \sum_j Q_{ij}^n f_j^n &\leq \sum_j f_j^n \quad y \\ \lim_{\tau \rightarrow 0} Q_{ij}^n &= \delta_{ij}, \end{aligned}$$

que pueden usarse para acotar la norma euclídea convencional $\|f^{n+1}\|$ del vector f en la $(n+1)$ -ésima iteración y limitar así la posible amplificación de la información inicial, una vez fijado el esquema discreto espacial. De este modo

$$\sum_i f_i^{n+1} f_i^{n+1} \leq \sum_j f_j^n f_j^n$$

es decir, $\|f^{n+1}\| \leq \|f^n\|$, que representa la *condición suficiente para la estabilidad* en los esquemas numéricos en diferencias. La igualdad si cumple se τ es idénticamente nulo. Además, la desigualdad se verifica para cualquier valor de τ , Δq , $\tau/\Delta q^2$, A_j y D_j lo que confiere al esquema estabilidad incondicional. El mantenimiento de la norma inicial unidad de f_0 a lo largo de la evolución, establecido por la propiedad de normalización para los elementos de la matriz Q , conduce a pensar que la estabilidad del método es una propiedad inherente al mismo. En cambio, para el caso general la forma de las funciones Q_{ij} no se ha establecido de forma unívoca, por lo que sólo cabe esperar que las propiedades atribuidas a las mismas contribuyan a la estabilidad del esquema global. Para un problema particular, con A y D conocidos puede realizarse el estudio de la estabilidad siguiendo algunos de los procedimientos habituales, desarrollados al efecto, para ecuaciones en diferencias.

En cualquier caso, siempre que la probabilidad de transición a tiempos cortos tenga las propiedades de una *función bien comportada*, en el sentido de las funciones de distribución en la teoría de probabilidades, la evolución de f supone a lo largo del proceso evolutivo, la generación de una sucesión $\{f^n\}$ de funciones de distribución, normalizadas a la unidad y acotadas superiormente. En otras palabras, el método resuelve esencialmente la ecuación integral (2.6), que presenta infinitas soluciones cuando no se fijan límites en la definición y características del propagador Π ; esta infinitud de soluciones se ha limitado por el conjunto de propiedades concedidas a P_τ en la sección 2.2.1, si la ecuación diferencial problema se toma como fuente de información a este fin y se procede según las pautas de cálculo dadas en la sección 2.2.2. No se espera, a priori, la existencia de causas de inestabilidad, siempre que el modelo de discretización espacial sea coherente con cada problema.

En todos los casos estudiados no se ha observado inestabilidad en la solución numérica integral, aun para problemas de ecuaciones no lineales de Fokker-Planck, en las que A y D dependen de la propia función f . En todos ellos las características de los términos de difusión y deriva contribuyen a conducir la evolución hasta una solución f^n con las características plenas de una función densidad de probabilidad y consistente con las propiedades físicas del problema.

La condición de estabilidad, sin embargo, no supone la convergencia de la solución numérica a la solución analítica evaluada en los puntos de la red discreta, si bien la consistencia orienta en cuanto al acotamiento entre ambas soluciones. En todos los casos estudiados la convergencia de la solución numérica hacia la solución estacionaria analítica, cuando ésta existe, es absoluta. Incluso para problemas sin solución estacionaria definida se ha observado la adecuada convergencia hacia la solución verdadera $f(q, t = n\tau)$, con n fijo, incluso para valores de τ mayores que los físicamente aceptables. En los problemas (2.25) para los que puede determinarse a priori la solución estacionaria, la convergencia de la solución numérica tras cierto número de iteraciones, asegura que el margen de proximidad entre la función numérica y la analítica en cualquier iteración, se ve notablemente reducido. Pueden consultarse los casos estudiados en el capítulo posterior, donde se ilustra la operatividad de método, a la vez que se sientan los precedentes básicos para el tratamiento de problemas físicos de mayor relevancia e interés. En particular, resulta interesante verificar la validez de los procedimientos descritos a lo largo de esta exposición para ecuaciones tipo EFP con marcado carácter no markoviano, en los que A y D dependen de la propia función de distribución f .

2.6 Conclusiones generales.

El método numérico desarrollado en este capítulo se fundamenta, esencialmente, en la naturaleza probabilística del problema representado por una ecuación diferencial tipo Fokker-Planck, entendida como una ecuación en la función densidad de probabilidad $f(\mathbf{q}, t)$. La solución integral en términos del propagador general $\Pi(\mathbf{q}, t | \mathbf{q}', t')$ de (2.2) inspira el tratamiento de la evolución temporal, en términos del propagador para valores pequeños de la diferencia $\tau = t - t'$ que, debido a la Ecuación de Consistencia (2.6), puede interpretarse como una probabilidad de transición a tiempos cortos P_τ . La expresión de P_τ se deriva para cada problema concreto resolviendo la ecuación auxiliar (2.24) a primer orden en el desarrollo de potencias en τ , para la EFP satisfecha por $\Pi(\mathbf{q}, t + \tau | \mathbf{q}', t)$. De este modo, es posible encontrar un modelo de probabilidad de transición a tiempos cortos que en el límite $\tau \rightarrow 0$ es consistente con el problema original, al cumplir las mismas propiedades de la sección 2.2.1, satisfechas por el propagador verdadero para cualquier τ , cuya expresión se asume como desconocida. A lo largo de la exposición se ha generado el algoritmo que ilustra la aplicabilidad del método. Así mismo se han ofrecido diversos modos de particularizar el procedimiento a cada problema en estudio, si bien las pautas esenciales a seguir son las mismas para cualquier ecuación tipo Fokker-Planck, siempre que los coeficientes de convección $A_i(\mathbf{q}, t)$ y difusión $D_{ij}(\mathbf{q}, t)$ se supongan explicitados en t y \mathbf{q} . De forma general puede extraerse el siguiente conjunto de conclusiones:

- 1.- El método se inspira en la naturaleza estocástica de la Ecuación de Fokker-Planck, lo que resuelve el problema de la evolución de la función de distribución, dando lugar a un esquema de avance temporal con pleno significado físico.
- 2.- El procedimiento de cálculo para la probabilidad de transición a tiempos cortos, mediante la reducción a una EFP lineal ordinaria, genera la representación de la función δ de Dirac ajustada a las características de cada problema.
- 3.- Del punto anterior se desprende que las condiciones de contorno quedan implícitas en la expresión del propagador P_τ .
- 4.- El esquema de avance temporal (2.36) para $f(\mathbf{q}, t + \tau)$ es totalmente explícito y no es necesario, por tanto, recurrir a procedimientos de inversión en la matriz de evolución \mathcal{Q} . Este hecho favorece la operatividad del método en la resolución de problemas tipo EFP donde los coeficientes de convección y difusión sean dependientes de f , ya que en P_τ sólo se involucra la presencia de éstas en la iteración anterior.
- 5.- La representación discreta de la n -ésima condición inicial $f^n(\mathbf{q})$ para la ecuación integral de evolución define los elementos de la matriz \mathcal{Q} . El carácter positivo de estos elementos mantiene la positividad de la función de distribución en todas las iteraciones.
- 6.- La norma de f se mantiene constante en cada iteración, ya que P_τ está normalizada. Así mismo, la flexibilidad en el diseño del modelo de discretización permite ajustar el esquema general a las propiedades conservativas de cada problema. Con esta finalidad se ha definido la función de autocorrelación numérica como corrección en orden τ^2 que, en consecuencia, no desvirtúa las características propias de la evolución.

- 7.- La solución numérica de la ecuación diferencial (2.25) se obtiene mediante la resolución de la ecuación integral de evolución (2.6), con una probabilidad de transición P_τ en la que se cuenta con los coeficientes de difusión y deriva del problema original. La evolución se halla dirigida por las características de estos coeficientes por lo cual, cada elemento de la sucesión de funciones $\{ f^n \}$ tiene las características de una función de distribución coherente con la ecuación diferencial en estudio. Este hecho optimiza la convergencia hacia la solución verdadera.

Bibliografía

- [1] Soler, M., Phys. Lett. A140, 373(1989)
- [2] Martínez F. C. and Soler M. , Eur. J. Mech. B/Fluids, 11, 555(1992)
- [3] Kuczka J., J. Math. Phys. 34(No.11), 5357(1993)
- [4] C. W. Gardiner: Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry and Natural Sciences, Springer Ser. Synergetics, Vol. 13 (Springer, Berlin, Heidelberg, New York) 1987
- [5] Dyson F. J., Phy. Rev., 75 (1949)162
- [6] H. Risken: The Fokker-Planck Equation, 2nd. ed., Springer Ser. Synergetics, Vol. 18 (Springer, Berlin, Heidelberg, New York) 1989
- [7] Haken H., Z. Physik B24, 321(1976)
- [8] Wissel C., Z. Physik B35, 185(1979)
- [9] S. Chapman and T.G. Cowling: The Mathematical Theory of Non-Uniform Gasses, 3rd. ed., (Cambridge University Press, Cambridge, 1970).
- [10] Adams J. B: and Hitchon W. N: G., J. Comput. Phys. 76, 159(1988)
- [11] Parker G. J., Hitchon W. N: G., Lawler J.E., J. Comput. Phys. 106, 147(1993)

Capítulo 3

Aplicaciones del Método Integral.

Una vez fijado el procedimiento general para la aplicación del método numérico integral, se abordan en este capítulo algunos de los problemas simples más conocidos en la literatura sobre ecuaciones de Fokker-Planck. Se pretende así mostrar las pautas a seguir para la resolución numérica de la ecuación diferencial, centrando el algoritmo general a las características propias de cada problema. Mediante la adecuada definición de los términos de difusión y deriva es factible construir un problema en el que la media y la desviación típica de la distribución permanecen constantes en el tiempo. En claro paralelismo de esta propiedad con los problemas de las magnitudes conservadas en ciertos sistemas físicos, el tratamiento de este proceso simple sentará las bases para la aplicabilidad del método en casos similares de mayor relevancia. La comparación de la solución analítica en cada etapa de la evolución con la solución numérica, dará idea del nivel de aproximación entre ambas y orientará sobre la convergencia del nuevo método.

Por otra parte, como aplicación del procedimiento trazado en el capítulo anterior para el cálculo de la probabilidad de transición a tiempos cortos, se han abordado problemas en los que la variable se halla restringida a un intervalo finito de la recta real. La adecuación de P_T a estos casos integra en ésta la existencia de las condiciones de contorno satisfechas por la función de distribución. El problema del tratamiento de las fronteras, resuelto en la sección 2.2.2 de forma general, se ilustra y justifica a través de los procesos abordados.

Por su importancia en los problemas de la Física Estadística se aplica el Método Integral a la resolución de ecuaciones no lineales de Fokker-Planck, esto es, ecuaciones formalmente análogas a las mismas para procesos estocásticos de Markov en las que los coeficientes de difusivos dependen de la propia función f . De forma general, este tipo de problemas se corresponde directamente con procesos estocásticos en los que persisten ciertos efectos de memoria. En particular, se han seleccionado casos de índole no lineal para los que es posible derivar la solución analítica, con el fin de establecer la aplicabilidad del algoritmo numérico a problemas afines. En este sentido se estudia el caso de una ecuación no lineal de Fokker-Planck unidimensional, formalmente equivalente a la Ecuación Cinética en la Física del

Plasma, para la que existe solución estacionaria, a la vez que permanecen constantes en la evolución los dos primeros momentos de la función de distribución. En todos los casos se ha procedido a la comparación de soluciones analíticas con las soluciones numéricas integrales y las obtenidas por métodos numéricos para esquemas en diferencias finitas. Los ejemplos resueltos en esta sección permiten derivar conclusiones de carácter general inherentes al nuevo método.

3.1 Proceso de Wiener.

El caso más simple de ecuación diferencial de Fokker-Planck lo constituye el proceso puramente difusivo ¹ de Wiener unidimensional [1], [2], [3] en el que el coeficiente de difusión D es constante. La ecuación diferencial para la función de distribución es, en este caso

$$\frac{\partial f(q, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f(q, t)}{\partial q^2} \quad a \leq q \leq b \quad (3.1)$$

con la condición inicial

$$f(q, t = 0) = f_0(q)$$

La justificación para el análisis de un proceso de Wiener unidimensional, se inspira en la posibilidad de generar un conjunto de probabilidades de transición adecuadas a las condiciones de contorno, y que servirán como base para la representación de la función δ de Dirac en problemas difusivos con D variable. Por otra parte, la importancia de este proceso desde el punto de vista analítico, estriba en el hecho de que cualquier problema de naturaleza estocástica puede descomponerse en sucesivos procesos de Wiener [4]. La aplicación de estos procedimientos de cálculo pueden extenderse al cálculo de la probabilidad de transición a tiempos cortos para al desarrollo del método en problemas menos simples.

Las condiciones de frontera se especifican en cada problema, no obstante, con objeto de preservar la norma unidad de la densidad f , en todos los procesos estudiados se trata con las denominadas *condiciones de reflejo*, que suponen la anulación de la corriente de probabilidad en los extremos del intervalo de definición de la variable. En este caso, tal condición impone

$$\frac{\partial}{\partial q} f(q, t) = 0 \quad \text{en } q = a \text{ y } q = b.$$

Dado que la probabilidad de transición $P(q, t|q', t')$ es solución de la ecuación (3.1) con la condición inicial especial $\tau = t - t' = 0$, se satisfará

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial q^2}; \quad P(q, t; q', t) = \delta(q - q'),$$

cuya forma es, para $-\infty < q < \infty$, la solución principal para la ecuación del calor, coincidente con (2.13) para el caso unidimensional

$$P(q, t + \tau; q, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D\tau}} \exp\left(-\frac{(q - q')^2}{4D\tau}\right) \quad (3.2)$$

¹ También resulta habitual en la literatura denominar *proceso de Wiener* al mismo problema con deriva constante diferente de cero.

que permitirá avanzar en el tiempo la función de distribución. En este caso la solución analítica para $f(q, t)$ queda establecida por aplicación directa de la ecuación de evolución (2.6) partiendo de $t' = 0$ y de $f_0(q)$. Al ser D constante (3.2) representa la probabilidad de transición válida para cualquier valor del paso temporal τ . La resolución numérica del problema puede parecer trivial a la vista de los resultados. Sin embargo, la utilidad práctica de la aplicación del método numérico radica en el hecho de poder establecer las características generales aplicables a procesos más complejos, en los que A y D pueden no ser constantes. El proceso de Wiener ha servido así como base para fijar pautas generales a seguir para la operatividad del método integral. Algunas de estas propiedades se han presentado ya en trabajos previos por parte de algunos componentes de nuestro grupo ([5]).

En primer lugar se ha considerado el problema relativo al intervalo real $]-\infty, \infty[$, sobre el que se define la función f , con el fin de calibrar los efectos procedentes de la definición de una red discreta necesariamente finita. Así mismo es posible abordar de forma tangible el procedimiento generador de los elementos Q_{ij} para la matriz de evolución Q , comprobando hasta qué punto la integración implicada en la ecuación integral de evolución puede efectuarse mediante los modelos habituales en la resolución numérica de integrales. El planteamiento de los esquemas numéricos establecidos seguidamente para el proceso Wiener, se aplicarán en la sección siguiente al caso de Ornstein-Uhlenbeck unidimensional y a problemas no lineales posteriormente.

Dado que la variable se extiende a lo largo de toda la recta real en el caso continuo, es conveniente elegir como valor máximo de la variable la cantidad q_m que permita anular numéricamente el valor de la función f en los extremos de la red discreta. La variable q se extiende sobre el intervalo $[-q_m, q_m]$, sobre él se diseñará la discretización apropiada para la resolución numérica de las integrales. En particular se propone una red intermedia que no contenga a los puntos frontera según (2.27). La justificación que conduce al establecimiento de esta red se encuentra en dos razones fundamentales. En primer lugar, el número de intervalos se hace así coincidir exactamente con el número de puntos en la red. En segundo lugar, esta discretización permite efectuar las integraciones numéricas mediante la sencilla aproximación de la Regla Extendida del Punto Medio, en la que los pesos correspondientes a cada coeficiente en la fórmula de cuadratura coinciden con la unidad. Este segundo argumento alude a la posibilidad de representar los coeficientes Q_{ij} mediante la relación simple $P_\tau(q_i, q_j | t_n) \Delta q$, cuando la n -ésima condición inicial f^n se genera a través de la suma de funciones $\delta(q - q_i)$ dada en la sección 2.3.2 por (2.28). De este modo puede contemplarse de forma más clara la conexión entre las integraciones numéricas y las integrales analíticas relativas a magnitudes conservadas en el problema físico. Por otra parte, la aplicación de la Regla Extendida del Punto Medio en las integrales de avance temporal ilustra con mayor claridad el sentido físico de los elementos de la matriz de evolución utilizada en el esquema numérico. No obstante ha de matizarse de nuevo, que la integración por rectángulos propuesta no es la única posible.

Si f_i^n representa el valor de la función $f(v, t)$ en el punto v_i y en el instante $t_n = n\Delta t = n\tau$, la ecuación de evolución se reescribe según

$$f_i^{n+1} = \sum_{j=1}^N P_{ij} f_j^n \Delta q$$

donde los términos $P_{ij}\Delta q$ son los coeficientes Q_{ij} de la matriz de evolución temporal \mathcal{Q} , en el esquema general (2.35). El término $f_j\Delta q$, si q representa la velocidad, se interpreta como el número de partículas con velocidades contenidas en el intervalo numérico donde se evalúa f_i . En particular, si la función de distribución física se renormaliza para que la integral anterior sobre toda la red se haga coincidir con la unidad, el área $f_j\Delta q$ representará la fracción de partículas del sistema cuya cuyo valor de la velocidad se encuentra entre $q_i - \Delta q$ y $q_i + \Delta q$.

Para el caso abordado en esta sección, los coeficientes P_{ij} se obtendrán a partir de $P_\tau(q, q'|\tau)$ en (3.2), siguiendo el mismo criterio de discretización aplicado sobre $f(q, t)$, con $q = q_i$ y $q' = q_j$. La condición inicial del problema para la función $f(q, 0) = f_0(q)$ permite avanzar temporalmente la función de distribución. El esquema resulta así especialmente simple en su aplicación al proceso de Wiener. Dado que P_τ está normalizada a la unidad analíticamente, cabe esperar que la suma

$$N_j = \sum_{i=1}^N Q_{ij}$$

sea también la unidad. Con excelente aproximación la normalización numérica para los Q_{ij} coincide con la unidad para valores del índice j no muy cercanos a los extremos $j = 1$ y $j = N$ para una retícula suficientemente amplia y ancho Δq razonable. Es obvio que el error en el cálculo de la integral de normalización N_j se debe a la limitación de la red sobre el intervalo $[-q_m, q_m]$, siendo este error de valor $\frac{1}{2}$ en los extremos de dicho intervalo. Conviene renormalizar los coeficientes Q_{ij} redistribuyendo, para j fijo, el área residual $1 - N_j$ de modo proporcional entre ellos. Este procedimiento equivale a redefinir las tasas Q_{ij} de la forma $Q'_{ij} = Q_{ij}/N_j$. Sólo los términos próximos a $j = 1$ o $j = N$ se verán significativamente afectados por la renormalización, pero su influencia en la función f^n será despreciable si ésta es prácticamente nula para dichos valores de j .

La argumentación precedente es válida siempre que realmente las normas N_j se hallen próximas a la unidad también en los puntos frontera de la red discreta. Sin embargo esto no ocurre para cualquier valor de los parámetros τ y Δq . Como ya se apuntó en el capítulo anterior, si el incremento temporal es pequeño comparado con el incremento espacial - o más concretamente con $(\Delta q)^2$ - los errores numéricos cometidos en la estimación de N_j para $Q_{ij} = P_{ij}\Delta q$ son significativos, y la norma numérica difiere de la unidad no sólo en los extremos de la red. En este caso ha de procederse a la sustitución de los términos Q_{ij} anteriores por los correspondientes (2.34)

$$Q_{ij} = \frac{1}{2} \left[\text{fer}\left(\frac{q_i - q_j + \Delta q/2}{\sqrt{4D\tau}}\right) - \text{fer}\left(\frac{q_i - q_j - \Delta q/2}{\sqrt{4D\tau}}\right) \right] \quad (3.3)$$

cuando f^n se representa por la suma de pulsos o histogramas rectangulares (2.31). Con parámetros q_m , τ , N , y Δq razonables las sumas $\sum_i Q_{ij}$ coinciden prácticamente $N_j = 1$, por lo que no es necesario renormalizar las funciones de (3.3). El inconveniente de los nuevos coeficientes de \mathcal{Q} estriba en el hecho de tener que evaluar $2N \times N$ funciones error, que en el caso de coeficientes de difusión y deriva dependientes de t habrá de efectuarse en cada paso temporal. En este sentido, por la simplicidad de $P_{ij}\Delta q$, cabe interrogarse sobre el margen de aplicabilidad de la integración original por rectángulos para implementar f^n . Para esta finalidad basta desarrollar las funciones fer de (3.3) en series de potencias en Δq ,

o concretamente, en serie de potencias en la razón $\lambda = \Delta q / \sqrt{\tau}$. De la propia definición de los coeficientes Q_{ij} se desprende que esta serie incluye sólo potencias impares de Δq para el caso general en que la probabilidad de transición coincide con (2.13). En particular, aquí se tiene

$$Q_{ij} = \Delta q P_{ij} + O((\Delta q)^3 / \tau^2) P_{ij}$$

que se reduce a la expresión original de los $Q_{ij} = P_{ij} \Delta q$ cuando el término es $(\Delta q)^3$ es pequeño. Por tanto, la aplicación de la integración por rectángulos usual será válida siempre que el resto de la relación anterior sea despreciable. Como P_τ depende de $1/\sqrt{\tau 4\pi}$ el resto $O((\Delta q)^3 / \tau^2) P_{ij}$ es proporcional a λ^3 , la aproximación de Q_{ij} por el primer término de la serie está pues en función de λ . Por otra parte, si se pretende que se satisfagan las relaciones

$$0 \leq Q_{ij} \leq 1 \quad \text{y} \quad \lim_{\tau \rightarrow 0} Q_{ij} = \delta_{ij}$$

es necesario que se verifique $\lambda \leq \sqrt{4\pi}$, lo que requiere tomar el paso temporal de tal forma que

$$\tau \geq \Delta^2 / (4\pi D), \quad \Delta \equiv \Delta q, \quad (3.4)$$

o bajo la condición más estricta $\tau \geq \Delta q^2 / 2D$, de este modo el resto del desarrollo anterior será despreciable para cualquier valor de la diferencia $q_i - q_j$ ya que éste decae exponencialmente según $\exp[-(q_i - q_j)^2 / (4D\tau)]$. En consecuencia, es preferible que el paso temporal sea relativamente grande comparado con $(\Delta q)^2$. Si se refina la red suficientemente, el valor mínimo del incremento temporal aconsejable se reducirá. En la práctica se observa que, si $D = 1$, basta tomar $\tau \approx 0.2\Delta^2$ para que $O(\Delta^3 / \tau^2) P_{ij}$ resulte despreciable, lo que permite elegir valores de τ pequeños incluso para redes no muy finas.

La aplicabilidad de la integración simple por rectángulos, que conduce a los coeficientes $Q_{ij} = P_{ij} \Delta q$ requiere el ajuste de la relación $\tau / \Delta q^2$ que, en general, dependerá del rango de variación del término difusivo D , si éste es función de q . Es interesante destacar que la condición restrictiva $\tau \geq \Delta^2 / 2D$, si se invierte el sentido de la desigualdad coincide con la *condición suficiente* para la estabilidad de un esquema explícito en diferencias finitas. En oposición a este último esquema, el modelo numérico integral requiere habitualmente, no sólo para el proceso de Wiener, el concurso de un paso temporal relativamente grande. En este caso la matriz de evolución contará con mayor número de elementos no nulos adyacentes a la diagonal principal. En otras palabras, los elementos Q_{ij} serán nulos para índices j tales que $|i - j| \geq K$ donde K representa cierto número entero; este hecho perfila una matriz de evolución Q $(2K + 1)$ -diagonal, por lo que el esquema de avance temporal queda fijado en la forma

$$f_i^{n+1} = \sum_{j=i-K}^{i+K} Q_{ij}^n f_j^n \quad (3.5)$$

donde K , para A y D dependientes de t será función de n .

Los resultados anteriores son extensibles a todos los problemas sobre los que el método integral resulta aplicable. En general, si se pretende desarrollar un esquema que permita una simple integración por rectángulos, sobre la condición (3.4) la constante D en el proceso Wiener ha de sustituirse por cierto valor D_{\min} que representa el mínimo de la función $D(q,t)$. Si los coeficientes de difusión D derivan únicamente del tiempo y existe la

constante D_{min} se podrá proceder de forma análoga a la aplicada para el caso tratado en esta sección. Por el contrario, si la estimación de τ no resulta posible, será necesario recurrir al procedimiento general para la definición de los Q_{ij} , en términos de la integral de P_τ en el subintervalo $[q_j - \Delta q/2, q_j + \Delta q/2]$.

Para el caso particular (3.1) sobre $]-\infty, \infty[$, cada f_i^n se ajusta exactamente a los valores obtenidos al discretizar sobre la red central, la función analítica $f(q, t)$ cuya expresión se conoce de modo exacto, ya que (3.2) es la función de Green para la ecuación de Wiener. Como condición inicial se ha elegido para $f_0(q)$ el histograma centrado en el origen, de anchura l , y normalizado a la unidad. En la sección siguiente se trata la ecuación diferencial correspondiente al proceso de Ornstein-Uhlenbeck, que supone una generalización de la ecuación de Wiener. Por esta razón no se consignan las figuras que ilustrarían la evolución de $f(v, t)$ que, además, no presenta solución estacionaria. El motivo de incluir aquí el caso de Wiener se justifica por la posibilidad de extraer conclusiones de carácter general, extensibles a la aplicación del método sobre otras ecuaciones de Fokker-Planck. Entre otras consideraciones, para el caso tratado pueden realizarse con facilidad estudios sobre convergencia, estabilidad y errores de truncamiento, llevados a cabo en algunos trabajos anteriores [6], [7], [8].

3.1.1 Proceso Wiener sobre un intervalo finito.

La resolución numérica del proceso de Wiener sobre el intervalo real $]-\infty, \infty[$ resulta en cierto modo trivial, y su utilidad radica en el establecimiento de las pautas de cálculo a seguir para otros problemas. Sin embargo, resulta interesante resolver numéricamente el problema original (3.1) sobre el intervalo finito $[a, b]$, con el fin de ilustrar el procedimiento dado en la sección 2.2.2 para evaluar la adecuada función P_τ ajustada a las condiciones de contorno del problema. En este caso, la probabilidad de transición (3.2) no será válida; la norma de ésta sobre el intervalo considerado no coincide con la unidad, de lo que se desprende que tampoco en esta expresión se recoge la adecuada representación del momento D . Mediante un cambio de escala y una traslación en la variable espacial, puede estudiarse el problema, sin pérdida de generalidad, sobre el intervalo $[-1, 1]$. En este caso, bajo las condiciones de reflejo en los extremos del intervalo, la solución fundamental para la probabilidad de transición con D constante es la conocida expresión

$$P(q, t + \tau | q', t) = \frac{1}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} e^{-n^2 \pi^2 D \tau} \cos(n\pi q) \cos(n\pi q')$$

válida para cualquier valor de τ si la condición inicial f_0 es una función par. La solución general, para cualquier f_0 , es

$$\begin{aligned} P = & \frac{1}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} e^{-n^2 \pi^2 D \tau} \cos(n\pi q) \cos(n\pi q') \\ & + \sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{sen}\left(\left(n - \frac{1}{2}\right)\pi q\right) \operatorname{sen}\left(\left(n - \frac{1}{2}\right)\pi q'\right) e^{-\left(n - \frac{1}{2}\right)^2 \pi^2 D \tau} \end{aligned} \quad (3.6)$$

En este caso existe solución estacionaria, ya que si $\tau \rightarrow \infty$ el propagador P tiende a la función constante $P_s(q) = 1/2$; en consecuencia, cualquiera que sea la condición inicial sobre f , ésta

evoluciona hasta la distribución uniforme $f_s(q) = 1/2$. A la vista de (3.6) los elementos Q_{ij} para la solución numérica integral, en virtud de (2.33) vienen dados por

$$Q_{ij} = \int_{u^-}^{u^+} P(q_i, t + \tau | q', t) dq' \quad (3.7)$$

con $u^\pm = q_j \pm \Delta q/2$. La suma en n se evalúa tras cortar la serie en un cierto valor L del índice n . En función del paso temporal, L debe elegirse de forma que la exponencial $\exp[-L^2\pi^2 D\tau]$ resulte numéricamente nula. Si se elige $\tau = 0,001$ basta tomar $L \sim 15$ y evaluar cada Q_{ij} una sola vez, ya que D no depende de t . De nuevo, los elementos de la matriz de evolución satisfacen las propiedades prescritas para los mismos en el capítulo anterior: son estrictamente positivos, acotados superiormente por la unidad y satisfacen la condición de normalización $\sum_i Q_{ij} = 1$. Respecto a las condiciones para la aplicabilidad de la integración por rectángulos, utilizando $Q_{ij} = P_{ij}\Delta q$, se ha observado que siguen siendo válidos los criterios fundamentados en los párrafos precedentes para el problema extendido sobre toda la recta real.

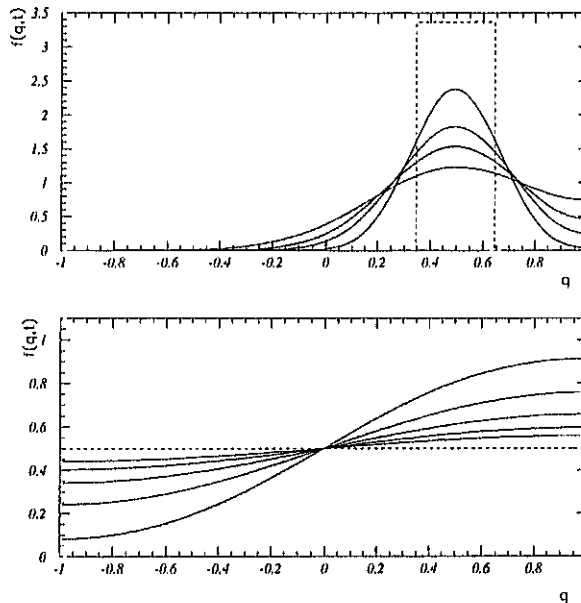


Figura 3.1: Proceso de Wiener en $[-1, 1]$.

Figura superior: evolución del histograma inicial f_0 durante el tiempo $t = 0,1$ en cuatro etapas equiespaciadas en t , con $\tau = 0,005$ y $\Delta q = 2/201$. La figura inferior muestra la evolución hasta un tiempo total de una unidad. El trazo punteado es la solución tras 2000 iteraciones.

La comparación entre la función analítica $f(q, t)$, particularizada en $q = q_i$ y $t = n\tau$, y la solución numérica justifica la aplicación del esquema numérico, ya que ambas soluciones

resultan prácticamente idénticas, incluso para valores de Δq y τ mayores que los físicamente aceptables. La solución numérica evoluciona hasta la distribución uniforme $f_s = 1/2$ estabilizándose en este valor para cualquier número de iteraciones. El problema de las condiciones de frontera queda resuelto de forma favorable mediante la elección de la probabilidad de transición adecuada para el problema continuo. De nuevo, la elección del propagador y la evaluación de las tasas de difusión Q_{ij} con el mismo, da lugar a un esquema numérico de avance temporal plenamente coherente con las características del problema — véase la *figura 3.1* —. Se ha comprobado en el caso específico del proceso Wiener en $[-1, 1]$ que la probabilidad de transición (3.2) resulta inadecuada para la resolución numérica del problema (*figura 3.2*). En principio, podría pensarse que el uso de P_τ en términos de la distribución gaussiana sería válida para generar los elementos de \mathcal{Q} si τ es suficientemente pequeño, sin embargo, a pesar de que esta función representa en el límite $\tau \rightarrow 0$ a la función δ esta representación no contiene en sí misma las características del problema particular. A menudo $\delta(q)$ suele representarse como el límite de una sucesión de funciones $\{g_n(q)\}$ cuando n tiende a infinito. Pero esta sucesión no es única y son, realmente, infinitas las sucesiones que generan la función δ de Dirac. También δ puede generarse a través de un conjunto de funciones ortonormales $\{\rho(\lambda, q)\}$ procedentes de un problema de autovalores tipo Sturm-Liouville; en definitiva, la representación de la función δ es arbitraria. Esta arbitrariedad se recorta notablemente al especificar el campo de definición y ciertas condiciones de frontera. Ello justifica la validez de la probabilidad (3.6) y la no utilización de (3.2) en la solución numérica (y analítica) del problema. Sin embargo, cabe esperar que tanto (3.2) como (3.6) resulten equivalentes sobre cierta región R interior del intervalo $[-1, 1]$, aun para τ finito. En función del incremento temporal, la expresión gaussiana resulta válida si se evalúa sobre valores q_j suficientemente alejados de los extremos q_1 y q_N . Es suficiente, en consecuencia, contar con la expresión (3.6) para ciertos q_j , si se desea reducir el tiempo de computación. El procedimiento a seguir es simple: se evalúan las normas $N_j = \sum_i P_{ij} \Delta q$ utilizando la probabilidad de transición (2.13); para los valores de j en los que N_j difiere de la unidad en más de una cierta constante ϵ , que marca el orden de aproximación deseado, cada P_{ij} se reemplaza por (3.6). La norma N_j se convierte así en un índice que marca la aplicabilidad de una u otra probabilidad de transición. Para una red de 50 puntos, por ejemplo, con $\tau = 0,001$ (3.6) resulta indispensable sólo para índices $j = 1, 2, 3$ y $j = N, N - 1, N - 2$. En la región interior $|q_j - 1| < 4\Delta q$ las dos expresiones propuestas para el propagador P difieren en menos de una millonésima, para cualesquiera i y j .

Del mismo modo, para problemas puramente difusivos, en los que D es una función de q , y bajo las mismas condiciones de contorno impuestas a la ecuación de Wiener, la función δ puede representarse por el conjunto de funciones ortonormales relativas a ésta. Ello se traduce, según la sección 2.2.2, en el cambio de D por $D(q')$ si no se procede a la factorización de D . De esta forma se asegura que las características del nuevo problema quedan recogidas en la representación δ y, consecuentemente, en el propagador P_τ para el paso temporal finito τ . Así mismo, se limita aún más la arbitrariedad de $\delta(q - q')$, al introducir rasgos propios del problema a través de la función $D(q')$.

Resulta esencial pues, definir correctamente la probabilidad de transición a tiempos cortos, mediante la resolución del problema auxiliar (2.24) en términos del nuevo operador L_{FP}^* , dado en el capítulo anterior. En particular, la resolución del problema de Wiener sobre un intervalo finito, genera un conjunto de representaciones para P_τ que pueden aplicarse

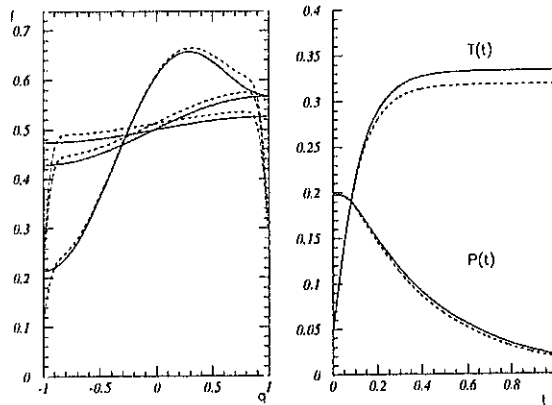


Figura 3.2: Solución integral divergente en Proceso Wiener.

Comportamiento de la solución numérica $f(q, t)$. El trazo continuo muestra la evolución cuando se utiliza la probabilidad P_r sujeta a las condiciones de reflejo en $q = \pm 1$. La línea punteada da la solución cuando se usa como propagador (3.2) renormalizado en $[-1, 1]$, es obvio que el comportamiento erróneo de f en las fronteras deriva en una solución que difiere notablemente de la real en todos los puntos de la red. También se desvían los valores de los momentos $P(t) = \langle q \rangle$ y $T(t) = \langle q^2 \rangle$ respecto a los reales - línea continua -.

a problemas difusivos con D variable. Si se incluye un término convectivo $A(q)$ el problema auxiliar se resuelve del mismo modo, esto es, aplicando el procedimiento simple habitual basado en el desarrollo en series de Fourier. La probabilidad de transición a tiempos cortos puramente gaussiana sigue siendo aplicable sobre puntos de la red suficientemente alejados de los extremos del intervalo, siempre que su norma coincida numéricamente con la unidad. En particular, se ha elegido para ilustrar esta sección el problema

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial q^2} D(q) f(q, t)$$

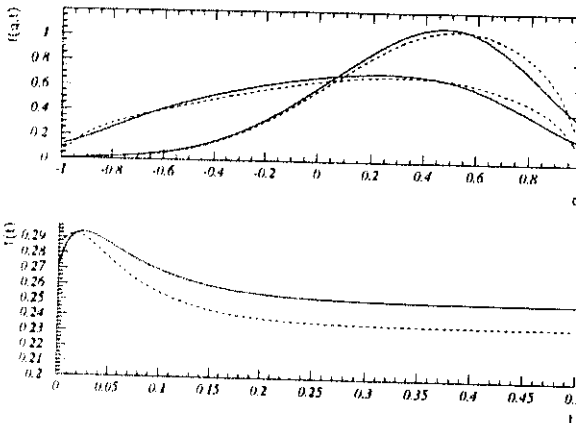
sobre el intervalo $[-1, 1]$, con $D(q) = 1/\sqrt{1 - q^2}$. El coeficiente de difusión es singular en $q = \pm 1$ por lo que el problema ha de resolverse bajo las condiciones de frontera

$$\frac{\partial}{\partial q} D(q) f(q, t) = 0 \quad \text{en } q = \pm 1.$$

En este caso también existe solución estacionaria $f_s(q) = 4/\pi\sqrt{1 - q^2}$ como se desprende al resolver la ecuación homogénea. La existencia de f_s favorecerá el análisis de la convergencia para el esquema numérico. Aplicando $D(q) \delta(q - q') = D(q') \delta(q - q')$, el operador auxiliar L_{FP}^* coincide con el operador de Fokker-Planck para el proceso de Wiener unidimensional. Así pues, los coeficientes de la matriz de evolución Q_{ij} vendrán dados por (3.7) cambiando D por $D_j = D(q_j)$, con la red discreta habitual (2.27) y la retícula auxiliar (2.32). En

cuanto a la evaluación de los Q_{ij} cabe destacar que el índice L que marca la limitación de la serie depende ahora de cada D_j , que crece a medida que q_j tiende hacia los extremos de la red. Para $\tau \approx 0,001$ el índice máximo L aconsejable se mantiene menor que $L = 20$ para todo valor de j . La evaluación de las normas numéricas $\sum_i P_{ij} \Delta q$ con la probabilidad de transición usual (2.13), impone que (3.7) es sólo necesaria para valores de q_j cercanos a los extremos del intervalo $[-1, 1]$, lo que reduce considerablemente el tiempo de computación. Cada serie se calcula sólo en la primera iteración y es válida para todo el proceso iterativo. Tampoco es necesario mantener en memoria los $N \times N$ elementos Q_{ij} , ya que gran parte de ellos son nulos. La simetría de P_τ también contribuye a reducir el número de operaciones. Como la red discreta es central, no contiene a los puntos $q = \pm 1$, lo que no crea problemas para el cómputo de cada Q_{ij} , aun cuando se refine excesivamente la red. El refinamiento de la red da lugar a valores de $D(q_j)$ excesivamente grandes sobre los extremos del intervalo $[-1, 1]$, si bien esto representa una ventaja para determinar los Q_{ij} al reducir en valor de L , es un problema para la resolución numérica paralela con un esquema implícito en diferencias finitas, al que se recurre para comparar con la evolución integral. En este último, las condiciones de contorno se simulan anulando las derivadas laterales de $\partial Df/\partial q$ en q_1 y q_N .

Si el problema se resuelve con (3.2) renormalizada en $[-1, 1]$, la deficiente evolución de f en los extremos de la red deriva en una solución errónea y en un cálculo deficiente de los momentos. La figura siguiente muestra este comportamiento en trazo discontinuo. El trazo continuo corresponde a los valores, prácticamente idénticos, obtenidos mediante el propagador apropiado y por el esquema implícito en diferencias finitas.



Se ha optado por resolver el problema mediante un esquema numérico en diferencias tipo Crank-Nicholson, válido hasta orden τ^2 en el paso temporal. Las derivadas se aproximan a segundo orden de Δq en diferencias centrales. Se observa que ambas soluciones numéricas prácticamente coinciden tras un reducido número de iteraciones, estabilizándose y convergiendo a la solución estacionaria analítica $f_s(q_j)$. Para el proceso de Wiener con $D = 1$, cada f_j^n obtenida por el procedimiento integral se ajusta más estrechamente a la

función verdadera $f(q_j, n\tau)$, que la correspondiente solución numérica en diferencias, si bien, a medida que aumenta el número de iteraciones, las tres soluciones coinciden prácticamente. De nuevo, el método numérico integral resulta estable para cualquier valor de τ y Δq . Conviene estimar el tiempo de relajación T del sistema en un primer ejercicio de aproximación, con el fin de ajustar el paso temporal a un valor físicamente razonable. En general, basta elegir para τ la cantidad $T/100$. De este modo la evolución numérica se contempla ampliamente satisfactoria y tanto el régimen transitorio como el estacionario quedan óptimamente representados por el esquema integral. En particular, la solución numérica estacionaria tiende a f_s a medida que aumenta en número de iteraciones. La figura 3.3 apoya los comentarios expuestos.

Esencialmente, los resultados obtenidos en esta sección son extensibles a problemas en los que se cuenta con efectos convectivos. Las condiciones de contorno se introducen en la correcta definición de la probabilidad de transición a tiempos cortos mediante la generalización del procedimiento anterior, si bien el propagador habitual (2.13) sigue siendo válido para aquellos valores q' suficientemente alejados de los extremos del intervalo (a, b) , sobre el que se define la distribución f . Sobre estos puntos interiores (2.13) es aplicable siempre que se halle normalizada a la unidad. Este hecho contribuye a reducir el cálculo de las sumas implícitas en las correspondientes series, que conducen en el límite $\tau \rightarrow 0$ a la función $\delta(q - q')$ del caso continuo. La probabilidad de transición en términos de series de Fourier resulta esencial para evaluar los coeficientes Q_{ij} sobre los q_j en un entorno de los extremos q_1 y q_N , cuyo radio disminuye a medida que se reduce τ .

3.2 Proceso de Ornstein-Uhlenbeck.

Uno de los procesos estocásticos markovianos más estudiados en la literatura es el problema de Ornstein-Uhlenbeck, también denominado de *la partícula de Rayleigh*, que surgió en los primeros momentos sobre el estudio del movimiento browniano [9], [3], [1]. Este problema recoge el efecto de la interacción de una partícula con un medio de partículas que suponen un fondo fijo. La descripción estocástica del movimiento, contenida en la ecuación de Langevin (1.1), involucra el concurso de un término fluctuante representado por un ruido blanco gaussiano, añadido a la contribución determinista representada por una fuerza de rozamiento viscoso proporcional a la velocidad $v = q$. De la ecuación diferencial en la variable estocástica, $\dot{\xi}(t) = v$, se pasa a la descripción correspondiente para las variables macroscópicas, representada por la ecuación diferencial de Fokker-Planck adecuada. En este caso tal ecuación se expresa, en una dimensión, como

$$\frac{\partial}{\partial t} f(v, t) = -\frac{\partial}{\partial v} [-\gamma v - D \frac{\partial}{\partial v}] f(v, t); \quad a \leq v \leq b \quad (3.8)$$

donde γ y D son constantes. El coeficiente de difusión D es positivo, mientras que γ puede tomar cualquier valor. La deriva $-\gamma v$ recoge el efecto de la interacción de cada partícula de la colectividad con un fondo fijo, mediante el concurso de una fuerza de fricción de carácter disipativo, proporcional a la velocidad. De aquí se desprende que, físicamente, el problema abordado no supondrá la conservación de la energía cinética del sistema, cuando f es interpretada como la función de distribución de un sistema de partículas idénticas

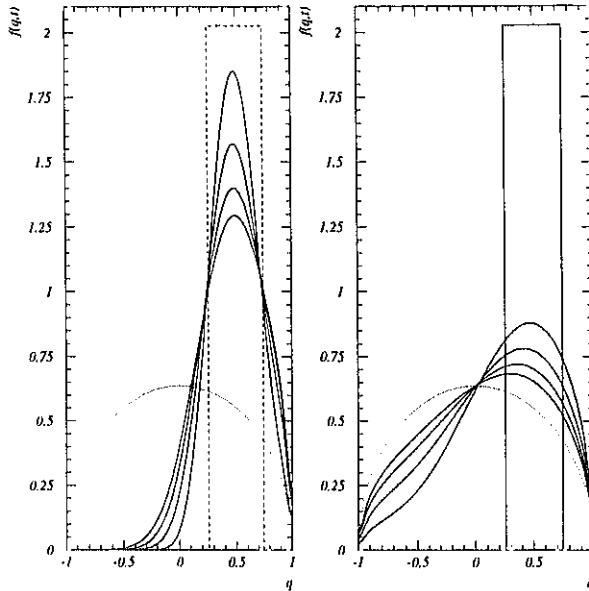


Figura 3.3: Proceso difusivo con D variable.

Evolución difusiva de f en las mismas etapas e iguales parámetros que los descritos para la figura del proceso de Wiener. La solución numérica en diferencias resulta prácticamente indistinguible de la solución integral.

sujetas a la descripción microscópica implícita en la ecuación de Langevin. De nuevo, el esquema numérico habrá de ser sólo consistente con el mantenimiento constante del número de partículas a lo largo de la evolución de $f(v, t)$ en lo que a magnitudes conservadas se refiere. Sin embargo, una formulación más general del problema permite redefinir el término de convección en la forma $A(v) = -\gamma(v - v_0)$, donde $F_0 = -\gamma v_0$ representa una fuerza constante por unidad de masa. La ecuación de Langevin correspondiente a la reformulación del problema muestra el fenómeno de difusión en un campo de fuerzas constante cuando la partícula interactúa a su vez con un fondo fijo de partículas y dicha interacción se evalúa a través del término $-\gamma v$. Si v puede tomar cualquier valor real, anulando la corriente de probabilidad y f en los límites $v \rightarrow \pm\infty$, la variación temporal del momento $p = \langle v \rangle$, dada por

$$\frac{\partial \langle v \rangle}{\partial t} = -\gamma [\langle v \rangle - v_0]$$

dicta la constancia de $\langle v \rangle$ en el tiempo, siempre que se elija como valor inicial $p_0 = v_0$. Análogamente, la ley de evolución para el segundo momento de la distribución $T = \langle v^2 \rangle$

$$\frac{\partial \langle v^2 \rangle}{\partial t} = 2 (D - v \gamma (v - p_0)),$$

establece que $T(t)$ será constante en el tiempo siempre que se tome para D el valor $D = \gamma(T_0 - p_0^2) > 0$, donde $T_0 = T(0)$. El término $T_0 - p_0^2$ representa la desviación cuadrática media $\sigma^2 = \langle v^2 \rangle - \langle v \rangle^2$ de la distribución inicial f_0 . Dado que tanto $p(t)$ como $T(t)$ permanecen constantes en el tiempo, la desviación $\sigma(t)$ será también constante a lo largo de la evolución temporal.

Con la finalidad de aplicar el método numérico integral a problemas físicos de mayor relevancia en los que L_{FP} representa un operador colisional que preserva la energía y el momento, se ha decidido resolver (3.8) para el caso en el que los dos primeros momentos de f permanecen constantes en el tiempo, en claro paralelismo con las leyes conservativas de la Física relativas al momento lineal y la energía. El objeto de tal elección es el de refrendar mediante un ejemplo simple la utilidad del método numérico integral para la resolución de problemas con magnitudes conservadas y a su vez, fundamentar mediante la experiencia el uso de la *función de autocorrelación numérica*, definida en el segundo capítulo.

La ecuación diferencial correspondiente al proceso de Ornstein-Uhlenbeck, para la probabilidad de transición $P(v, t|v', t')$, viene dada por

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v} [\gamma(v - v_0) + \frac{\partial}{\partial v} D] P \quad ; \quad P(v, t|v', t) = \delta(v - v')$$

cuya solución, cuando v puede tomar cualquier valor real, es una gaussiana de media \bar{v} y desviación σ^2

$$\begin{aligned} P(v, t|v', t') &= \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(v - \bar{v})^2}{2\sigma^2}\right] \quad \text{con} \\ \bar{v}(v', t - t') &= v_0 + (v' - v_0) e^{-\gamma(t-t')} \quad \text{y} \\ \sigma^2(v', t - t') &= (T_0 - v_0^2) [1 - e^{-2\gamma(t-t')}] \end{aligned} \quad (3.9)$$

que depende sólo de la diferencia $t - t'$. Cuando $t - t'$ tiende a infinito, la probabilidad de transición tiende a la solución estacionaria que coincide con la distribución normal en la variable v , de media p_0 y desviación típica $T_0 - p_0^2$ iguales a la media y desviación iniciales, siendo constantes durante toda la evolución. La solución analítica para la función de Green (3.10) permite derivar exactamente la expresión de $f(v, t)$. La evolución numérica de la función de distribución puede compararse en cada paso temporal con la función analítica $f(v, t)$ evaluada en los puntos de la red discreta habitual (2.27). Por otra parte la existencia de solución estacionaria favorece, en este caso, el análisis de la convergencia y estabilidad del método numérico.

La probabilidad de transición a tiempos cortos (2.13) adquiere para este caso, la forma

$$P_\tau = P(v, v'|\tau) = \frac{1}{\sigma_\tau\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(v - m)^2}{2\sigma_\tau^2}\right] \quad (3.10)$$

donde $m = v' - \gamma(v' - v_0)\tau$ y $\sigma_\tau^2 = 2D\tau = 2(T_0 - v_0^2)\tau$. Si el tiempo total de evolución t se subdivide en M intervalos de anchura $\tau = t/M$, es posible determinar la ley de evolución de los momentos p_n y T_n en el n -ésimo paso temporal de forma analítica, sin proceder a la integración numérica sobre la red espacial. Teniendo en cuenta la ecuación integral de

evolución para $f^{n+1}(q)$, resulta sencillo obtener las relaciones de recurrencia

$$\begin{aligned} p_{n+1} &= p_n(1 - \gamma\tau) + \tau\gamma p_0 \\ T_{n+1} &= T_n(1 - \gamma\tau)^2 + 2\tau D \\ &\quad + 2\gamma\tau p_0 p_{n+1} - (\gamma\tau p_0)^2 \end{aligned}$$

ya que la integral sobre v' en (3.10) es resoluble analíticamente. Con las condiciones iniciales p_0 y T_0 , si se elige $\tau \ll 1/\gamma$, las relaciones recursivas anteriores presentan las soluciones

$$\begin{aligned} p_{n+1} &= p_0 \\ T_{n+1} &= T_0 r^{2n} + \frac{2T_0 - \gamma\tau p_0^2}{2 - \gamma\tau} (1 - r^{2n}) \\ \text{con } r &= (1 - \gamma\tau) < 1 \end{aligned} \quad (3.11)$$

que muestran la constancia del momento p_n para cualquier iteración, siendo T_n variable. Si el número de iteraciones n aumenta indefinidamente para un valor de τ fijo, se observa que T_n tiende a $(T_0 - \gamma\tau p_0^2)/(1 - \gamma\tau/2)$, que difiere de T_0 en orden τ . Este hecho corrobora la afirmación dictada en el capítulo anterior sobre el error de truncamiento global para f^n . Por el contrario, si se procede al límite $\tau \rightarrow 0$ manteniendo $n\tau = t$ constante, se recuperan los momentos verdaderos $T(t) = T_0$ y $p(t) = p_0$. Con el fin de reducir los errores cometidos en la evaluación de los momentos en cada paso temporal es posible recurrir a una corrección a segundo orden de potencias en τ sobre la desviación σ_τ del propagador a tiempos cortos. Si se toma $\sigma_\tau = 2D\tau(1 - \tau\gamma/2)$, los momentos p_n y T_n son tales que

$$\begin{aligned} p_{n+1} &= p_n(1 - \tau\gamma) + \tau\gamma v_0 = p_0 \\ T_{n+1} &= T_n(1 - 2\gamma\tau) + 2\tau\gamma T_0 = T_0 ; \end{aligned}$$

el operador integral de evolución conservará tanto p como T en cada iteración, al igual que el operador verdadero en términos de (3.10). De forma general, si (2.13) se elige como probabilidad de transición a tiempos cortos con desviación $\sigma_\tau = 2D(q', t)\tau$ puede añadirse a ésta el término corrector $-\tau^2 \langle A(q, t_n)^2 \rangle_n$, que asegura, al menos analíticamente, la conservación de p_n y T_n . Es fácil verificar que la modificación de σ_τ no altera la norma de P_τ ni las propiedades establecidas en la sección 2.2.1, al representar una corrección de segundo orden en τ . No debe extrañar la presencia en σ_τ de un término aditivo proporcional a τ^2 , ya que $(q - q' - \tau A)^2$ cuenta ya con un sumando en la forma $\tau^2 A^2$.

Para la solución numérica integral del problema de Ornstein-Uhlenbeck con momentos p y T constantes se ha procedido de forma análoga al procedimiento presentado para el proceso de Wiener sobre $[-\infty, \infty]$, con la probabilidad de transición (3.10) con (y sin) corrección en σ_τ .

3.2.1 Solución numérica.

De nuevo la evolución temporal de la función de distribución arranca de la condición inicial tipo pulso de anchura $B - A$ para $f(v, 0)$. La constante γ se absorbe en el tiempo t , de tal forma que γt es una variable adimensional. Dado que γ orienta sobre el tiempo de relajación

t_r para el proceso de Ornstein-Uhlenbeck, estimado del orden $t_r = 1/\gamma$, el problema ha de resolverse con un paso τ tal que $\tau \ll 1$. Con la finalidad de estudiar los tiempos relajación para la solución numérica, y la convergencia de la misma hacia la solución verdadera en cualquier instante fijo $t = n\tau$ tras n iteraciones, se procede a obtener la forma analítica de $f(v, t)$ con

$$f(v, 0) = \begin{cases} 0 & \text{si } v < A \\ 1/(B - A) & \text{si } A \leq v \leq B \\ 0 & \text{si } v > B. \end{cases} \quad (3.12)$$

Los parámetros A y B se han elegido de forma que de $f(v, 0)$ se obtengan los momentos iniciales $\langle v \rangle(0) = p_0$ y $\langle v^2 \rangle(0) = T_0$. Esencialmente, la razón para seleccionar esta condición inicial se encuentra en el hecho de que cualquier otra función $f_0(v)$ puede representarse como suma de funciones en la forma (3.12). La función $f(v, t)$ puede obtenerse al aplicar la ecuación integral de evolución sobre la condición inicial, con la probabilidad de transición (3.10) válida para cualquier valor de $t - t'$. De este modo se tiene la distribución analítica para todo $t > 0$, según

$$\begin{aligned} f(v, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} P(v, t|v', 0) f(v', 0) dv' = \\ &= \frac{1}{2z(A - B)} \left\{ \text{fer}\left[\frac{Az - v}{\sqrt{2D(1 - z^2)}}\right] - \text{fer}\left[\frac{Bz - v}{\sqrt{2D(1 - z^2)}}\right] \right\}; \quad z = e^{-\gamma t} \end{aligned} \quad (3.13)$$

donde $\text{fer}[\cdot]$ representa la *función error*. La forma estacionaria para $f(v, t \rightarrow \infty)$ es la distribución normal gaussiana, de media $p_0 = v_0$ y desviación típica $T_0 - p_0^2$.

La comparación entre la función $f(v, t)$ exacta, y la correspondiente solución numérica f_i^n permite evaluar la eficiencia del método integral, así como inferir algunas de las propiedades generales del esquema de avance temporal, que pueden generalizarse para la resolución de otras ecuaciones tipo Fokker-Planck. El problema de Ornstein-Uhlenbeck, resuelto mediante el procedimiento numérico propuesto, resulta especialmente interesante por presentar un término convectivo variable independiente del tiempo. La probabilidad de transición a tiempos cortos (3.10) es coherente con el problema tratado en esta sección, ya que se satisfacen para el caso continuo las condiciones impuestas a P_τ en la sección 2.2.1.

Al igual que en el problema de Wiener, la variable v se extiende sobre toda la recta real, por lo que, en el caso discreto será necesario definir la red unidimensional, de extremos suficientemente grandes para que puedan despreciarse los valores de la propia función f sobre ellos. Sobre el intervalo $(-v_m, v_m)$ se ha propuesto la discretización utilizada para el problema de anterior, sobre una red intermedia que no contine a los puntos fronteras según (2.27). La resolución numérica de las integrales surgidas en el esquema de avance se llevan a cabo mediante la aplicación directa del esquema numérico con los elementos Q_{ij} dados por (2.34). A pesar de que la integral que define los términos de la matriz de evolución puede resolverse exactamente, ya que $A(v')$ es proporcional a la variable de integración v' , se ha optado por mantener A en la forma $A_j = A(v_j)$, como si se tratara de un caso general en el que A y D son funciones cualesquiera.

Nuevamente se plantea la cuestión sobre la aplicabilidad de la integración simple por rectángulos, sustituyendo cada Q_{ij} por $P_{ij}\Delta v$. En este caso, la presencia de la convección A propicia el desplazamiento del máximo de la distribución P_τ desde $v = v_j$ hasta $v =$

$v_j + \tau A_j$, lo que puede contribuir a que la norma $\sum_i Q_{ij}$ difiera de la unidad aun para puntos alejados de los extremos v_N y v_1 . Sin embargo, si el paso temporal es suficientemente reducido este desplazamiento resulta prácticamente inapreciable, a pesar de que A_j es proporcional a v_j , cuyo valor máximo es del orden de cinco unidades, si T_0 es la unidad; f_j resulta prácticamente nula en v_1 y v_N . Así pues, las condiciones establecidas para el caso sencillo de un proceso puramente difusivo del proceso de Wiener son válidas para el problema con deriva abordado aquí. Debe tenerse en cuenta que si se procede a la integración por la Regla Extendida de Punto Medio, el parámetro τ ha de satisfacer de nuevo la condición prescrita para la ecuación de Wiener, esto es, debe cuidarse τ sea mayor que $\Delta v^2 / \sqrt{\pi D}$, como establece la condición (3.4). Si el incremento temporal elegido no satisface la condición anterior, se procede a sustituir $P_{ij} \Delta v$ por Q_{ij} según (2.33).

La regla simple de integración por rectángulos permite contemplar con mayor claridad el significado físico del método numérico. La función $f(v, t)$ en el caso discreto tomará el valor constante f_i^n sobre el intervalo espacial $(v_i - \Delta v/2, v_i + \Delta v/2)$ entre los instantes t y $t + \tau$. La función de distribución es entendida, de este modo, como una sucesión de pulsos de anchura Δv y altura f_i^n centrada en cada v_i de la red discreta. El área de cada pulso, $f_i^n \Delta v$, se interpreta como la fracción de partículas del sistema con velocidades comprendidas entre $v_i - \Delta v/2$ y $v_i + \Delta v/2$, cuando la constante de normalización para f sobre toda la red se ha tomado como la unidad. Cada elemento Q_{ij} representa, en consecuencia, la proporción de la cantidad de partículas $f_j^n \Delta v$ que pasa de tener velocidad v_j en el instante $n\tau$, a tener velocidad v_i en el instante $(n+1)\tau$. La normalización $\sum_i Q_{ij} = 1$ asegura la constancia de la cantidad de partículas del sistema.

Los elementos Q_{ij} de la matriz de evolución Q se calculan a partir de la correspondiente expresión para la probabilidad de transición a tiempos cortos (3.10), para $v = v_i$ y $v' = v_j$, siendo $A(v', t) = -(v_j - v_0)$ y $D(v', t) = D$. Los coeficientes de difusión y deriva son independientes del tiempo, ello requiere evaluar los Q_{ij} antes de comenzar el proceso de avance, y utilizarlos en cada paso temporal posteriormente. Los términos Q_{ij} han de satisfacer la condición de normalización inherentes a las propiedades de la probabilidad de transición en el caso continuo. Esta condición supone, para el caso discreto, que habría de verificarse la relación

$$c(j) = \sum_{i=1}^N P_{ij} \Delta v = 1.$$

La suma $c(j)$ anterior se aproxima notablemente a la unidad para valores del índice j no muy próximos a los extremos - $j = 1$ y $j = N$ - de la red. La diferencia de $c(j)$ con respecto a la unidad es inapreciable para la red elegida, con $\Delta v \sim 0.02$ y $\tau \sim 0.01$, para $j = 3, 4, \dots, N-2$. Esta diferencia proviene, esencialmente, de restringir los límites de integración al intervalo $(-v_m, v_m)$ en la integral convergente extendida sobre toda la recta real. La diferencia entre el valor correcto de la integral de normalización y la integral numérica disminuye notablemente para los puntos interiores de la red, ya que el término exponencial decae rápidamente a cero cuando la diferencia $(i - j)$ aumenta. Una primera estimación del error E_j cometido en el cálculo de la integral, al restringir el intervalo de integración a $[-v_m, v_m]$ viene dada por

$$E_j \leq 1 - \frac{1}{2} \operatorname{erf}\left(\frac{vm}{2\sqrt{\tau}}\right) \quad (\text{si } j = 1 \text{ y } j = N),$$

que decrece cuanto mayor sea el valor del extremo de la red v_m , o cuanto más reducido sea el paso temporal τ . Para los restantes puntos de la red E_j se mantiene menor que la cota de error correspondiente a $j = 1$ y $j = N$. No obstante, dado el carácter finito de τ el valor de la función error en la expresión anterior puede ser apreciablemente menor que la unidad. La propagación del error cometido puede ser significativa para gran número de iteraciones, lo que afectaría al valor de las cantidades conservadas del problema. Al igual que para el proceso de Wiener extendido a toda la recta real, conviene renormalizar las tasas convectivo-difusivas Q_{ij} redefiniéndolas en la forma $Q_{ij}/c(j)$. Sólo los extremos de la distribución se verán afectados por la corrección introducida, mas si f_j^n resulta prácticamente nula en las cercanías de $\pm v_m$, el efecto sobre el resto de la distribución es inapreciable. Los nuevos Q_{ij} siguen siendo estrictamente positivos, pues $c(j)$ también lo es, al ser suma de términos positivos definidos por la exponencial implícita en la probabilidad de transición a tiempos cortos. Así mismo, se satisface la relación $Q_{ij} \leq 1$ y, exactamente, $\sum_i Q_{ij} = 1$. Análogamente, es fácil verificar que $\lim_{\tau \rightarrow 0} Q_{ij} = \delta_{ij}$, equivalente a la condición inicial $P(v, t|v', t) = \delta(v - v')$ para el caso continuo.

El número de elementos no nulos de la matriz de transición Q queda determinado por el valor del paso temporal τ . Conviene elegir τ de tal modo que los P_{ij} sean apreciablemente mayores que cero, para cada índice i , en un entorno de v_i limitado a k intervalos a izquierda y derecha de v_i . De este modo las integraciones numéricas que conducen a la evolución de f , se reducen a sumas sobre el índice j extendidas entre $j = i - k$ y $j = i + k$. Una vez estimado el valor de k , sólo es necesario contar con la participación de $(2k + 1)N$ elementos de la matriz Q , que presenta la forma de una matriz k -diagonal. Si el paso temporal aumenta el índice k será mayor, lo que supone un incremento en el tiempo de computación al resolver las integrales numéricas. Sin embargo, la evolución hacia la situación estacionaria de equilibrio se traduce en un menor número de iteraciones. La compensación entre ambos efectos, para problemas de coeficientes de difusión y deriva independientes del tiempo, torna irrelevante la elección de un valor particular de τ . Sólo razones de precisión numérica en los programas, requieren la modificación del paso temporal. Un análisis estimativo sobre los efectos de aumentar el paso temporal para cada problema, ayudará a la elección apropiada de los parámetros τ y k , en función de Δv .

Si f_i^n denota el valor de la función de distribución en el punto v_i , en el instante $t = n\tau$, el esquema numérico viene dado por la relación

$$f_i^n = \sum_{j=1}^N Q_{ij} f_j^{n-1} \quad (3.14)$$

donde la suma en j se ha extendido, en principio, sobre toda la red. Para el sencillo problema que ocupa esta sección, la extensión de las sumas a toda la red no aumenta esencialmente el tiempo de computación, aun para una red muy fina de 200 puntos sobre un intervalo $(-5, 5)$. De forma general, cada sumatoria contará sólo con $2k + 1$ sumandos distintos de cero, una vez fijado el valor de k tal que para $|i - j| > k$ se tenga $Q_{ij} = 0$.

Debe notarse que en el esquema numérico presentado en el párrafo anterior, en Q_{ij} se representan simultáneamente los efectos convectivo y difusivo. La convección, $A = -\gamma(v - v_0)$, tiende a desplazar hacia $v = v_0$ a las partículas que ocupan una determinada posición en la red. Este efecto de deriva es tanto más significativo cuanto mayor es la diferencia $v_j - v_0$.

Sin embargo, el término convectivo aparece afectado por el factor τ dentro del argumento de la exponencial en el cálculo de las probabilidades de transición. En función del valor concedido al paso temporal, el efecto de la deriva se hará notar sobre intervalos más o menos alejados de la j -ésima celda, cuyo contenido se distribuye a celdas adyacentes, por efectos simultáneos de difusión y deriva. En el tratamiento de este problema no se ha recurrido a la factorización del avance temporal, mediante el recurso de computar la convección y la difusión a través de dos matrices diferentes. Este proceso de factorización inspiró los primeros trabajos sobre el método numérico integral y originó las primeras investigaciones sobre el tema. El procedimiento de factorización mencionado responde a una elección diferente para la probabilidad de transición a tiempos cortos. Así, si la solución formal de la ecuación de Fokker-Planck dada por (2.12) se expresa como

$$P(v, t + \tau | v', t) = [1 + \tau \frac{\partial^2}{\partial v^2} D(v', t)] \delta(v - v') + [1 - \tau \frac{\partial}{\partial v} A(v', t)] \delta(v - v') - \delta(v - v')$$

que en el límite $\tau \rightarrow 0$, se reescribe como

$$P(v, t + \tau; v', t) = \exp[\tau \frac{\partial^2}{\partial v^2} D] \delta(v - v') - \exp[\tau \frac{\partial}{\partial v} A] \delta(v - v') - \delta(v - v').$$

El primer sumando de esta expresión conduce a la probabilidad de transición (2.13) puramente difusiva, mientras que el factor $\exp[-\tau \partial/\partial v A(v', t)]$, al actuar sobre la función $f(v, t)$, produce en ésta una traslación de valor $-A\tau$ en la variable v , lo que en el esquema de avance equivale a someter a traslación el contenido de la j -ésima celda: parte del mismo se distribuirá sobre las celdas adyacentes. A la vista de esta nueva probabilidad de transición, el proceso de avance temporal se contempla descompuesto aditivamente en dos subprocesos, difusivo y convectivo. No obstante, en el límite cuando el paso temporal τ tiende a cero, todas las probabilidades de transición utilizadas convergen al problema continuo. La interpretación anterior presenta el inconveniente de que, si $\tau A(v', t)$ es relativamente grande, la matriz convectiva ha de contar con mayor número de elementos, a fin de contabilizar el trasvase del contenido de un intervalo dado a tres, o más, celdas adyacentes. Por esta razón se ha procedido a la elección de la probabilidad (2.13) que permite evaluar simultáneamente las tasas de convección y difusión sin recurrir, a priori, a esquemas de avance a k puntos dados prefijado τ en función del valor máximo de la convección A' .

Para todos los casos computados se ha efectuado la comparación entre la solución numérica f_i^n y el valor de la solución exacta (3.13), calculando ésta sobre el punto medio de cada intervalo $(v_i - \Delta v/2, v_i + \Delta v/2)$ en $t = n\tau$ cada cierto número de iteraciones. Antes de proceder a la obtención de la solución numérica estacionaria, se ha dejado evolucionar el sistema hasta completar un tiempo global del orden de $1/\gamma = 1$, para el cual la media de la probabilidad condicional analítica (3.10) decae en un factor e^{-1} . Tomado $\tau = 1/n$ para n iteraciones, la diferencia entre la solución numérica y la solución verdadera disminuye a medida que aumenta n , si bien la diferencia entre ambas es ya inapreciable para $n = 10$. La corrección a segundo orden en τ , establecida sobre la desviación σ_τ de la probabilidad de transición a tiempos cortos mantiene prácticamente constantes los momentos de primer y segundo orden de la distribución f^n . Este hecho contribuye a optimizar la convergencia de la solución numérica en un número relativamente reducido de iteraciones. Obviamente, el ajuste con la solución analítica se mejora al aumentar el número de pasos para un tiempo

fijo de evolución. En todos los casos se procede simultáneamente a resolver el problema mediante un esquema implícito en diferencias finitas tipo Crack-Nicolson, que representa una aproximación a segundo orden de potencias en los incrementos τ y Δv . La evolución de ambas soluciones numéricas es paralela, siendo prácticamente idénticas aun para pasos temporales del orden de una décima parte del tiempo de relajación $1/\gamma$. Resulta interesante notar que la velocidad de evolución de la solución numérica es la misma que la observada para la función exacta (3.13), tan sólo se aprecia un ligero adelanto de aquélla sobre los extremos de la red, como consecuencia de la imprecisión introducida en las tasas convectivo-difusivas Q_{ij} . Es posible concluir, a la vista de estos resultados, que para valores de τ físicamente razonables, la solución numérica integral para el proceso de Ornstein-Uhlenbeck converge a la solución verdadera para cualquier instante t de la evolución. Si la probabilidad de transición a tiempos cortos no se encuentra corregida sobre σ_τ , el paso temporal ha de reducirse para mejorar la convergencia. En este caso, el momento T_n de la distribución numérica difiere significativamente del momento exacto $T(t) = T_0$ para $\tau \sim 0, 1/\gamma$. En cualquier caso, la solución numérica integral siempre representa un proceso difusivo, manteniendo la positividad de f . En cambio, la solución dada por el esquema en diferencias puede dar lugar a comportamientos no difusivos de la distribución, incluso a valores negativos de f_i para algún q_i como muestra la *figura 3.4*.

En cuanto al análisis de la convergencia hacia la solución estacionaria, se procede a fijar τ y dejar evolucionar el sistema aumentando el número de iteraciones. Se pretende ahora verificar la eficiencia del modelo integral para la descripción del estado estacionario, bajo la perspectiva de generalizar su aplicabilidad a problemas físicos de mayor relevancia, en los que interesa representar coherentemente el estado de equilibrio. Interesa en este caso verificar la estabilidad de la solución numérica estacionaria, así como analizar el valor de las magnitudes conservadas por el sistema.

Dado que la probabilidad de transición a tiempos cortos no es única, es posible, como se afirmó en el segundo capítulo, adecuar la expresión de la misma a las características propias del sistema en estudio. Un primer paso para la optimización de P_τ se fijó mediante la modificación de la desviación σ_τ . A pesar de que esta modificación genera un operador que preserva los valores iniciales de las tres cantidades constantes en la evolución, el efecto de la discretización en la variable espacial desvirtúa ligeramente esta propiedad. Conviene en este caso recurrir a la *función de autocorrelación numérica* Ψ_n en la que se depositará la responsabilidad del ajuste de las tasas Q_{ij} a las propiedades del sistema. Ψ_n recoge en sí misma el efecto de la integración sobre las variables v' en la definición de los elementos de la matriz de evolución, mediante la sustitución de A_j por $\Psi_n A_j$. Según (2.44), el parámetro de ajuste Ψ vendrá dado por la relación recursiva

$$\Psi_{n+1} = \Psi_n + C_0 (T_n - T_0) , \Psi_1 = 1$$

donde C_0 es una constante positiva cualquiera que reproduce el orden de la desviación relativa $(T_1 - T_0)/T_0$ en la primera iteración. En general puede elegirse cualquier C_0 , ya que las características mismas del sistema conducen a un valor fijo de Ψ_n tras un reducido número de iteraciones. El valor de Ψ_n oscila en torno a la unidad, fijándose en una cierta cantidad próxima a $\Psi = 1$ cuando T_n y T_0 coinciden. La función de autocorrelación representa una corrección de orden τ^2 para P_τ . En el caso más desfavorable, dicha corrección aparece en el argumento de la exponencial de (3.10) por lo que no modifica sustancialmente las

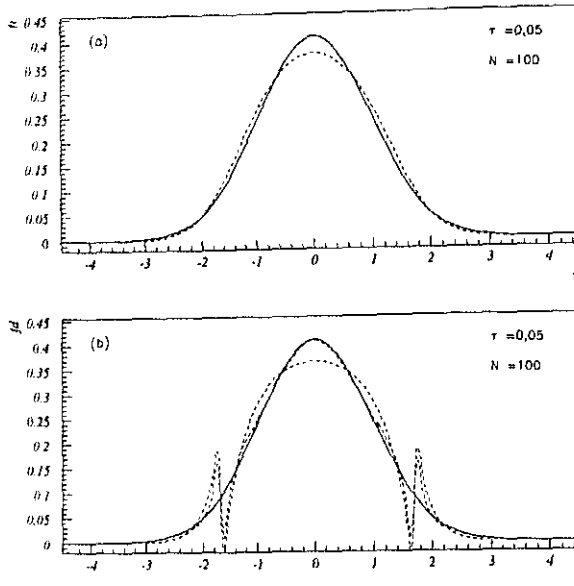


Figura 3.4: Proceso Ornstein-Uhlenbeck (I).

(a) Comportamiento difusivo de la solución integral f_i para $\Delta q = 10/201$ en 100 y 200 iteraciones. (b) Solución por Crank-Nicholson f_d ; para el valor de τ indicado la solución no difusiva se mantiene durante más de 100 iteraciones. La situación se corrige tras 200 pasos. f_i y f_d coinciden prácticamente para $n\tau > 1$.

propiedades del operador. De hecho, cada Q_{ij} con el término Ψ_n coincide prácticamente con el mismo valor sin la corrección en A_j . Sólo a lo largo de la evolución el efecto corrector de Ψ resulta apreciable.

En último extremo, la presencia de Ψ debe inducir a pensar que se ha optado por representar el propagador a tiempos cortos por una expresión diferente a la habitual (3.10), en la que la media $v' + \tau A(v')$ se ha corregido mediante el concurso de una función dependiente del tiempo t , cuya forma explícita en principio se desconoce, lo que justifica el ajuste recursivo anterior. Ya se ha mencionado que la representación de P_τ no es única y que el operador de Fokker-Planck genera toda una clase de probabilidades de transición equivalentes en el límite $\tau \rightarrow 0$.

En el problema que acupa esta sección la amplitud de máxima oscilación para Ψ_n es del orden de $\pm 0,01$. Es interesante señalar que si se procede a corregir de forma idéntica el término convectivo A_j sobre un esquema en diferencias finitas, la evolución de la solución numérica se desvía notablemente de la solución verdadera, generando incluso valores negativos de f_i^n y alterando hasta el valor constante de la norma inicial de la distribución, lo que se traduce en la variación inevitable de los momentos p_n y T_n a pesar de que éstos evolucionen sin la corrección de forma aceptable, dentro de las posibilidades que ofrecen dichos

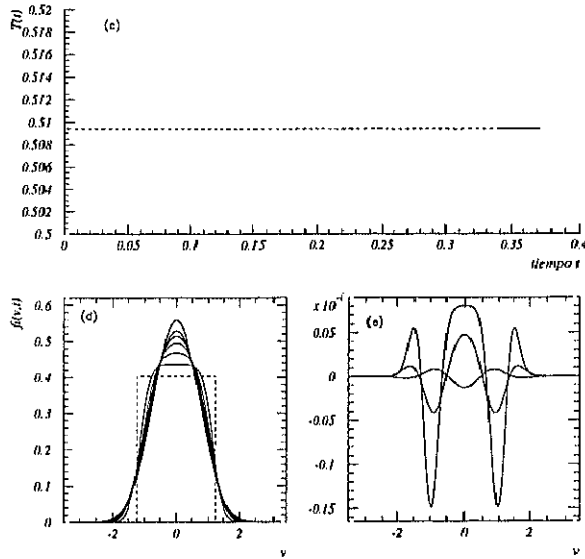


Figura 3.5: Proceso O-U (II). Solución numérica f_i y analítica f .

modelos para la aproximación de la solución verdadera. Este hecho se debe esencialmente a que Ψ introduce una corrección que puede representar otra ecuación diferencial diferente a la del problema original, lo que incurre en la no consistencia con el caso continuo. Sin embargo, para el modelo numérico integral la consistencia con el problema continuo, representado por la ecuación integral de evolución, no se afecta al modificar la probabilidad de transición a tiempos cortos mediante el ejercicio de la corrección impuesta, ya que ésta no modifica ninguna de las propiedades dadas en la sección 2.2.1 .

La figura 3.5 muestra la evolución del pulso inicial (3.12) hasta la solución estacionaria numérica -fig.(d)-. En el efecto corrector de la función de autocorrelación se integran también los posibles errores de redondeo cometidos en la computación, disminuyendo la diferencia entre la solución integral f_i y la verdadera f -fig.(e)-. El valor de T_n -fig.(c)- permanece estacionario con independencia absoluta del número de iteraciones. El excelente comportamiento de la función numérica f_i^n contemplado en la evolución de un pulso cuadrado inicial, se hace extensible a cualquier condición $f(v, 0)$ elegida para la distribución inicial, dada la posibilidad práctica de tratar ésta como una sucesión de 'ondas cuadradas' con normas individuales $f_j^0 \Delta v$. La superposición de las soluciones numéricas para cada pulso dará la evolución de f^n .

3.2.2 Proceso Ornstein-Uhlenbeck con $0 < v < \infty$.

Para el tratamiento de ecuaciones cinéticas en función de la componente radial v de la velocidad, la probabilidad de transición a tiempos cortos ha de estar definida sobre la semirecta real positiva. Esta condición impone recurrir a una representación de la función δ en la que se contengan las condiciones de contorno óptimas en la nueva variable del problema. En esta sección se investiga sobre las propiedades que han de ser satisfechas por P_τ cuando no se trata con las condiciones de contorno naturales definidas en la sección anterior. Se ofrece un modelo de probabilidad de transición a tiempos cortos aplicable a casos más generales, cuya efectividad resulta equiparable a la expresión habitual de P_τ dada por (2.13). En definitiva, el estudio numérico del proceso de Ornstein-Uhlenbeck con $v > 0$, al igual que el problema de Wiener sobre $(-1, 1)$ ilustra el procedimiento a seguir para el tratamiento de las condiciones de frontera.

La formulación del problema implica añadir a la ecuación diferencial para la probabilidad de transición $P(v, t|v', t')$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v} [-\gamma v + \frac{\partial}{\partial v} D] P ; P(v, t|v', t) = \delta(v - v'),$$

la condición $v \geq 0$, lo que equivale a afirmar que la corriente de probabilidad J ha de anularse no sólo en el infinito, sino también en el origen, esto es

$$J(v, t) = AP - \frac{\partial}{\partial v} DP = 0 ; v \rightarrow 0, \quad y \quad v \rightarrow \infty. \quad (3.15)$$

Por esta razón la probabilidad de transición a tiempos cortos P_τ debe satisfacer (3.15) cualquiera que sea la representación elegida, lo que fijará en este caso el intervalo $[0, \infty[$ como su campo de definición. El problema auxiliar (2.24) de la sección 2.2.2 debe resolverse con la misma condición que habría de imponerse al propagador original P .

De nuevo, con el fin de comparar la solución numérica con la correspondiente solución analítica, se ha investigado la ecuación diferencial para la probabilidad, con la condición de reflejo en el origen. Mediante la reducción a un problema de autovalores, se tiene (para $\gamma = 1, D = 1$)

$$P(v, t|v', t') = \frac{1}{\sqrt{\pi y}} \left\{ e^{-\frac{(v-xv')^2}{y}} + e^{-\frac{(v+xv')^2}{y}} \right\}; \quad z = e^{-(t-t')}, \quad y = 1 - z^2. \quad (3.16)$$

Como condición inicial para la función de distribución, por las mismas razones aducidas en la sección anterior respecto a este punto, se ha considerado una función (3.12) tipo pulso cuadrado de extremos $a > 0$ y $b > a$ normalizada a la unidad. Con (3.16) y (3.12) la expresión para la función f en todo instante t de la evolución es

$$f(v, t) = \frac{1}{2z(b-a)} \left\{ \text{fer}\left[\frac{v+zb}{y}\right] - \text{fer}\left[\frac{v-zb}{y}\right] + \text{fer}\left[\frac{v-za}{y}\right] - \text{fer}\left[\frac{v+za}{y}\right] \right\},$$

cuya solución estacionaria es la gaussiana $\sqrt{2/\pi} \exp(-v^2/2)$ definida para $v \geq 0$.

La discretización sobre el intervalo finito $[0, vm]$, de acuerdo con lo establecido en secciones precedentes, responde a la red de N puntos

$$v_i = (i - 1/2) \Delta v, \quad \Delta v = vm/N ; \quad i = 1, 2, \dots, N$$

que no contiene a los puntos frontera. Sobre esta retícula se definen, como es habitual, los valores de la función de distribución en el instante $t = n\tau$ notados por f_i^n . La función analítica se evalúa sobre la misma red, con el fin de comparar la evolución del problema discreto con el continuo. El esquema numérico de avance es el mismo que el propuesto para el proceso de Ornstein-Uhlenbeck tratado en la sección anterior.

Como se ha indicado, en primer lugar será necesario recurrir a un modelo de probabilidad de transición a tiempos cortos P_τ coherente con las condiciones del problema, que en este caso se sintetizan sobre la imposición $v > 0$. Es fácil verificar que (2.13) no satisface las propiedades requeridas para P_τ al no encontrarse normalizada a la unidad en el intervalo $[0, \infty[$. La representación de función δ de Dirac en términos de la integral de Fourier no es coherente con el problema que ahora se trata, máxime si ha de tenerse en cuenta que de ella se desprenderá el operador integral $\mathcal{U}_{t+\tau, t}$ para τ finito. Obviamente, la representación δ más apropiada para el problema habría de ser el límite de la probabilidad de transición exacta cuando $t \rightarrow t'$, pero ello supondría conocer a priori la función de Green para la ecuación de Fokker-Planck, lo que equivale a tener resuelto el problema. Para las ecuaciones objeto de este estudio no es posible conocer de forma exacta la probabilidad de transición, por ello ha de recurrirse al procedimiento generado en el segundo capítulo para el cálculo de P_τ .

Conviene recalcar de nuevo que si P_τ se representa por (2.13) renormalizada, el comportamiento de la solución numérica no es el esperado en las proximidades del origen $v = 0$, si bien, a medida que v se aleja del origen, f_i^n se aproxima a la solución verdadera aun para τ relativamente grande. Este resultado es obvio, ya que la probabilidad de transición puramente gaussiana está, a efectos prácticos, normalizada a la unidad en los puntos interiores de la red cuando τ es reducido.

En lugar de tomar la representación de Fourier para $\delta(v - v')$, se elige la correspondiente a otro problema más simple que el tratado, y que satisfaga las mismas propiedades que éste. Para aproximación de P_τ a primer orden de potencias en τ

$$P(v, t + \tau | v', t) = [1 + \tau A(v') \frac{\partial}{\partial v} + \tau D \frac{\partial^2}{\partial v^2}] \delta(v - v') \simeq \exp\{\tau [A(v') \frac{\partial}{\partial v} + \tau D \frac{\partial^2}{\partial v^2}]\} \delta(v - v') \quad (3.17)$$

el segundo miembro puede interpretarse como la solución formal de la ecuación diferencial lineal de Fokker-Planck auxiliar (con A y D constantes)

$$\frac{\partial P^*}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial v} [A + D \frac{\partial}{\partial v}] P^* ; \quad -A > 0, \quad D > 0,$$

que puede resolverse por el procedimiento habitual de reducción a un problema de autovalores $P^* = \exp(-\lambda\tau) \varphi(\lambda, v)$ [2], [10], [11]. Las autofunciones $\{\varphi(\lambda, v)\}$ correspondientes a P^* son conocidas (véase [12]) y presentan un espectro continuo en λ que conceden la representación buscada de la función δ . Substituída ésta en (3.18), se genera la probabilidad de transición a tiempos cortos aplicable al problema tratado:

$$P_\tau(v, v' | t) = \frac{e^{-\lambda(v-v'-A\tau/2)/2}}{\sqrt{4\pi\tau}} \left\{ e^{-\frac{(v-v')^2}{4\tau}} + e^{-\frac{(v+v')^2}{4\tau}} \right\}$$

$$-\frac{|A|}{2} e^{Av} \left[1 - \operatorname{erf}\left(\frac{v+v'+A\tau}{2\sqrt{\tau}}\right) \right]; \quad A = -v'. \quad (3.18)$$

La forma funcional de la probabilidad $P(\tau)$ es más compleja que la expresión exacta (3.16). Sin embargo, la misma función podría utilizarse para el esquema de avance temporal correspondiente a una ecuación de Fokker-Planck, definida sobre $v \geq 0$ con $A(v, t) \leq 0$. En las proximidades del origen, la función (3.18) resulta apreciablemente diferente a la probabilidad usual (2.13). Al igual que en el problema de Wiener sobre un intervalo finito, se ha elegido la representación de P_τ anterior para aquellos puntos v_i y v_j en los que la suma $\sum_i P_{ij} \Delta v$ difiere notablemente de la unidad cuando P_{ij} se evalúa con (2.13). Para valores del paso temporal razonables ($\tau \ll 1/\gamma$) es suficiente tomar la representación (3.18) para índices j en los que v_j es próxima al origen. El problema se resuelve bajo las mismas condiciones para la aplicabilidad de la integración simple por rectángulos impuestas en el proceso de Ornstein-Uhlenbeck general.

La matriz de evolución Q tiene $N \times N$ elementos de los cuales sólo es necesario calcular $(2M+1) \times N$ elementos, ya que Q es una matriz $(2M+1)$ -diagonal. Los únicos términos Q_{ij} diferentes de cero son aquéllos para los que $|i-j| \leq M$, donde M dependerá del ancho del paso temporal τ . Se ha observado que para valores de τ razonables, M se reduce a $M=3$ ó $M=4$, es decir, la integración numérica para cada v_i se reduce a unos cuatro puntos adyacentes al i -ésimo intervalo $[v_i - \Delta v/2, v_i + \Delta v/2]$. Para la computación basta guardar en memoria los términos $Q_{i,i-4}, Q_{i,i-3} \dots Q_{i,i+4}$.

El esquema de avance numérico con (3.18) presenta resultados tan satisfactorios como los encontrados en la resolución del problema precedente. Las gráficas adjuntas muestran cómo la solución numérica f_i^n se aproxima a la solución gaussiana estacionaria $C \exp(-v^2/2)$ con la misma velocidad de evolución que la obedecida por la función exacta $f(v, t)$. Los tiempos de relajación en el esquema numérico son los mismos que los observados para el problema resuelto analíticamente.

Puede concluirse que la resolución numérica del problema, mediante el algoritmo integral, se corresponde plenamente con la solución analítica (figura 3.6).

Se han ensayado otras condiciones iniciales $f(v, 0)$ para arrancar el esquema de evolución: para todas ellas, los tiempos de relajación obtenidos mediante el procedimiento numérico coinciden con los esperados analíticamente. La solución estacionaria es siempre la gaussiana predicha por la correspondiente ecuación de Fokker-Planck; no se presenta inestabilidad en la solución numérica, con independencia del número de pasos temporales y de los parámetros $\Delta t = \tau$ y Δv involucrados en la discretización del problema.

La solución numérica paralela mediante un esquema en diferencias finitas progresa adecuadamente excepto en las inmediaciones del borde de la red durante las primeras iteraciones. Aunque la solución numérica estacionaria coincide a efectos prácticos con $f_s(v_i)$ y con la solución integral, la velocidad de evolución en el esquema en diferencias se altera respecto a la misma para la función analítica $f(v, t)$ en los extremos. La información contenida en el paquete inicial $f_0(v_i) \Delta v$ se propaga más lentamente en el esquema en diferencias que en el integral sobre tales extremos. Sin embargo, el efecto de la condición de reflejo en el origen queda perfectamente reproducido por el modelo numérico integral con un tiempo de evolución idéntico al mostrado por la solución analítica.

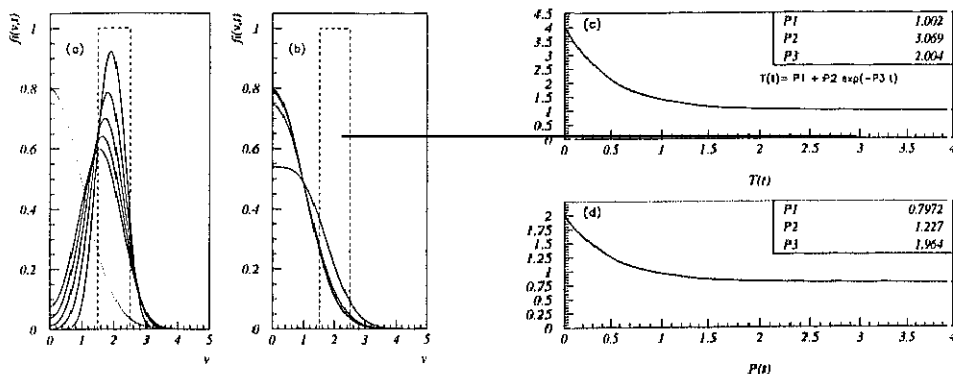


Figura 3.6: Proceso O-U en $[0, \infty[$.

(a) Evolución detallada en cinco etapas de 20 iteraciones con $\tau = 0,05$ y $\Delta q = 1/201$. La línea punteada muestra la solución estacionaria real. (b) Evolución de f_i en 100, 400, 800 y 1000 iteraciones. (c) y (d) Momentos $T(t)$ y $p(t)$ ajustados a los parámetros $P1$, $P2$ y $P3$ de la expresión mostrada en el gráfico. El tiempo de relajación estimado del sistema $1/P3 = 1/2,004$ coincide prácticamente con el teórico $t_r = 1/2$ aun sin el uso de la autocorrelación numérica.

3.3 Proceso de Ornstein-Uhlenbeck variable.

Hasta aquí todas las ecuaciones de Fokker-Planck unidimensionales resueltas presentan coeficientes de difusión y deriva independientes del tiempo. Conviene ahora cuestionar la validez del método integral para problemas en los que A y D pueden ser funciones de la variable t . Con esta finalidad se han estudiado varios problemas simples con solución analítica conocida, para el análisis comparativo de ésta con la solución numérica. Se pretende así extender las conclusiones anteriores a problemas con coeficientes variables. A la vista de la ecuación integral para el movimiento de $f(v, t)$ (2.9) el esquema numérico sólo requiere el concurso de los coeficientes A y D en el instante $t_n = n\tau$ para la obtención de f^{n+1} . Si bien es posible recurrir a métodos tipo *predictor-corrector* al igual que en los esquemas en diferencias, se ha optado por resolver las ecuaciones que siguen sin ningún tipo de corrección que supongan una complejidad añadida a la sencillez característica del modelo. Se espera que el propagador a tiempos cortos recoja convenientemente los efectos inducidos por la variación temporal de los coeficientes difusivos. Bajo la perspectiva de que P_τ representa una aproximación a primer orden en τ del propagador verdadero, $P(v, t + \tau | v', t')$, cabe esperar que el modelo de integración numérica siga siendo, para estos casos, una poderosa herramienta de cálculo. La extensión del modelo a ecuaciones de Fokker-Planck no lineales se verá así justificada.

Entre los problemas con A y D variables tomados de la literatura se ha elegido el *proceso de Ornstein-Uhlenbeck variable* representado por la ecuación diferencial lineal de Fokker-Planck

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial v}[-\gamma(t)(v - g(t)) - D(t)\frac{\partial}{\partial v}]f \text{ con } a \leq v \leq b \text{ ó } v \in]-\infty, \infty[\quad (3.19)$$

donde γ y v_0 de (3.8) se han sustituido por funciones del tiempo $\gamma(t) \geq 0$ y $g(t)$.

El coeficiente de difusión $D(t) > 0$ se supone una función de t . La ecuación satisfecha por la probabilidad de transición $P(v, t|v', 0)$ es la misma que (3.19), cuando f se sustituye por P , ya que $P(v, t|v', 0)$ es la solución a esta ecuación bajo la condición inicial $f(v, 0) = \delta(v - v')$.

Es fácil probar, para $-\infty < v < \infty$, aplicando el operador de la transformada de Fourier, que la solución de (3.19) para la probabilidad de transición es la gaussiana

$$P(v, t|v', 0) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(v - \bar{v})^2}{2\sigma^2} \right] \quad (3.20)$$

de media $\bar{v}(v', t)$ y desviación $\sigma^2(v', t) = \bar{v}^2 - (\bar{v})^2$ soluciones de las ecuaciones diferenciales ordinarias

$$\frac{d\bar{v}}{dt} = -\gamma(t) (\bar{v} - g(t)) \quad \text{con } \bar{v}(v', 0) = v', \quad (3.21)$$

$$\frac{d\bar{v}^2}{dt} = 2 \{D(t) - \gamma(t)\bar{v}^2 + \gamma(t)g(t)\bar{v}\} \quad \text{con } \bar{v}^2(v', 0) = v'^2.$$

En este caso, el propagador $P(v, t|v', t')$ no depende, en general, de la diferencia $t - t'$, por ello no puede hablarse de la existencia de solución estacionaria P_s , en el sentido de la teoría de procesos markovianos,² si P_s representa el límite de P cuando $(t - t') \rightarrow \infty$. No obstante puede darse el caso de que las funciones $\gamma(t)$, $g(t)$ y $D(t)$ tiendan hacia sendas constantes a medida que aumenta t . En este sentido puede hablarse de solución estacionaria cuando t tiende a infinito. El motivo de trabajar con tales sistemas se inspira en el hecho de que en numerosos problemas de la Física, relativos a ecuaciones cinéticas integro-diferenciales de Fokker-Planck, la deriva y la difusión son funciones suficientemente regulares en t , que varían lentamente a lo largo de la evolución, alcanzando valores prácticamente estacionarios.

Según 3.22 es evidente que se puede determinar a priori la ley de evolución temporal de los momentos de la distribución f , lo que favorece la comparación con los momentos obtenidos numéricamente

$$A(v, t) = -a(v - v_0), \quad D(t) = (T_0 - v_0^2)(1 + e^{-2at}); \quad a > 0 \quad (3.22)$$

y

$$A(v, t) = -\gamma(t)(v - v_0), \quad D(t) = (T_0 - v_0^2)\gamma(t); \quad \gamma(t) > 0 \quad \forall t. \quad (3.23)$$

En ambos procesos, v_0 y T_0 representan los momentos de primer y segundo orden de f_0 , siendo $p(t) = \langle v \rangle(t)$ constante en el tiempo para el primer caso (figura 3.7), en el que $T(t) = \langle v^2 \rangle(t)$ tiende al valor inicial T_0 a medida que aumenta el tiempo. Sólo en (3.23) $\langle v^2 \rangle(t)$ se conserva para cualquier función $\gamma(t)$ ya que D es proporcional a $\sigma_0 = T_0 - v_0^2$. Es obvio que este problema puede resolverse definiendo una nueva variable temporal $t^* = \int^t \gamma(t') dt'$, sometiendo a traslación la variable espacial según $z = v - v_0$, lo que reduce la ecuación de Fokker-Planck a la del proceso de Ornstein-Uhlenbeck ordinario (3.8). No obstante, se ha mantenido la forma original con la finalidad de observar el comportamiento

²ya que, en general, no se satisface la relación $P(v, t + T|v', t' + T) = P(v, t|v', t')$ para $T > 0$, por lo que el proceso se dice *no estacionario*

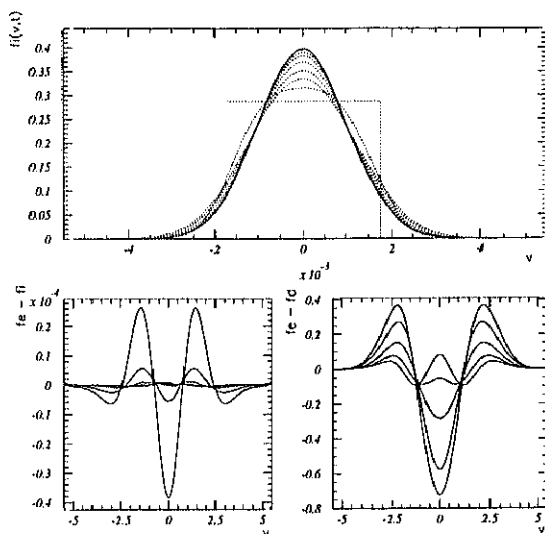


Figura 3.7: Proceso con A y D variables en t (I).

Figura superior: solución integral en un tiempo total de 5 unidades con $\tau = 0,1$ en el caso con $D = (T_0 - v_0^2)(1 + e^{-2t})$. f_i no evoluciona a partir de $t > 5$ coincidiendo con la gaussiana estacionaria (línea continua). Las gráficas inferiores representan las diferencias entre la solución exacta f_e y las numéricas integral y en diferencias f_i y f_d . A medida que aumenta t la diferencia $f_e - f_i$ disminuye.

de la solución numérica para coeficientes de difusión y deriva variables con el tiempo, e inferir así propiedades generales extrapolables a problemas menos simples.

El interés de esta elección es puramente académico, ya que se desea investigar la validez del método integral en la descripción de problemas con más de una cantidad conservada, si bien, en sentido físico, el operador L_{FP} no es conservativo. La proporcionalidad de D con σ_0 es meramente fortuita, del mismo modo que lo es la fuerza determinista dependiente de $v - v_0$. En cierto sentido, existe algún paralelismo con las ecuaciones cinéticas de la Física, en cuanto que A y D dependen de los momentos de la distribución. En concreto, ambos coeficientes pueden contemplarse como

$$A = -\gamma(t) \int (v - v') f(v', t) dv' \quad \text{y} \quad D = \gamma(t) \int (v - \langle v \rangle(t)) f(v', t) dv'$$

En último extremo, puede pensarse que la ecuación (3.19) representa el comportamiento de un conjunto de partículas cuya difusión es controlada por un potencial dependiente del tiempo que genera un campo variable encargado de preservar la energía y el momento de la distribución. La obtención de la probabilidad condicional $P(v, t | v', t')$ de $f(v, t)$, conocida f_0 , es trivial en función del sistema de ecuaciones diferenciales lineales ordinarias (3.22). Para los dos ejemplos tratados es sencillo verificar la condición de Lindeberg ([4]) satisfecha por un proceso markoviano continuo, así como la ecuación de Chapman-Kolmogorov (2.7):

los dos procesos analizados siguen siendo markovianos.

La solución numérica integral de (3.23) se da en la *figura 3.9*. $T(t)$ permanece constante a efectos prácticos, al igual que $P(t)$, cuya fluctuación en torno a $P_0 = 0$ entra dentro del orden de la aproximación numérica, sin una propagación efectiva de errores de redondeo. $A(t)$ y $D(t)$ (*figura 3.10*) aumentan con t sin afectar a la expresión del propagador P_τ .

En los dos problemas, la probabilidad de transición a tiempos cortos se ha elegido coincidente con (2.13) cuando la desviación σ_τ se representa por $2D(t) \tau (1 - \tau \langle A^2 \rangle / 2D)$, si el término corrector $(1 - \tau \langle A^2 \rangle / 2D)$ se mantiene positivo para cualquier valor de t . Una vez estimado el orden del tiempo de relajación t_r del sistema, se elige el paso temporal $\tau \ll t_r$. El espaciado Δv de la red discreta se supone independiente de t , con ello el esquema utilizado en los procesos anteriores es aplicable al proceso variable. La solución numérica integral se compara con la solución verdadera y la solución numérica dada por un esquema en diferencias finitas tipo Crank-Nicholson, con un *predictor* mediante un avance en diferencias explícito para estimar los valores de los A_j^{n+1} y D_j^{n+1} . En el primer ejemplo, es fácil determinar la ley de evolución analítica para el segundo momento de la distribución $T(t)$, ello permite aplicar la relación recurrente (2.44) para el uso de la función de autocorrelación numérica Ψ que contribuye a redirigir la evolución del sistema en el sentido que se minimiza la diferencia entre el momento numérico T_n y el momento real $T(t_n)$. Como $D(t)$ está acotada entre su valor inicial D_0 y $2D_0$ en toda la evolución, la variación de Ψ es prácticamente inapreciable si la desviación típica del propagador a tiempos cortos se halla corregida con el término $\tau \langle A^2 \rangle$.

El comportamiento de la solución f^n es similar a los observados para aquellos problemas en los que A y D son independientes del tiempo. Por otra parte, $D(t)$ varía lentamente con el tiempo; si se elige un paso temporal razonable $\tau \ll t_r$ la solución numérica integral coincide prácticamente con la solución verdadera en cada etapa de la evolución, ajustándose exactamente los valores de p_n y T_n a los momentos verdaderos casi desde la primera iteración. en cada v_i y $t_n = n\tau$. Los resultados se presentan en las *figuras 3.7* y *3.8*.

Se han tratado numerosos problemas en los que tanto A como D varían lentamente con el tiempo, cuando éstos alcanzan valores estacionarios, A_s y D_s , y carecen de singularidades en la variable espacial. De forma general, bajo estas condiciones (no muy restrictivas, si se contempla que las características prescritas para A y D son las satisfechas por gran número de problemas físicos) el método integral resulta aplicable en los términos que han venido presentándose a lo largo de toda la exposición para coeficientes independientes del tiempo. Una vez más se aprecia que la inclusión de $A(v, t)$ y $D(v, t)$ en la probabilidad de transición a tiempos cortos dirige la evolución de f en el sentido que lo haría con la expresión verdadera del propagador.

En las aplicaciones tratadas P_τ es muy próxima la $P(v, t + \tau | v', t)$, ello prodría inducir a pensar que la forma de P_τ dirige la evolución hacia la solución estacionaria gaussiana. Sin embargo se ha abordado el estudio de numerosos procesos en los que existe solución estacionaria diferente, tipo Pearson [12], obteniéndose resultados igualmente satisfactorios. Puede verse, en particular, el análisis de los procesos no markovianos que ilustran la última sección del capítulo, como ejemplos de interés puramente académico.

Especialmente interesante resulta el estudio del caso (3.23) para distintas funciones $\gamma(t)$ continuas en t y posiblemente no acotadas superiormente. Puede entenderse que el problema representado por la EFP correspondiente es comparable a un proceso físico que se comporta

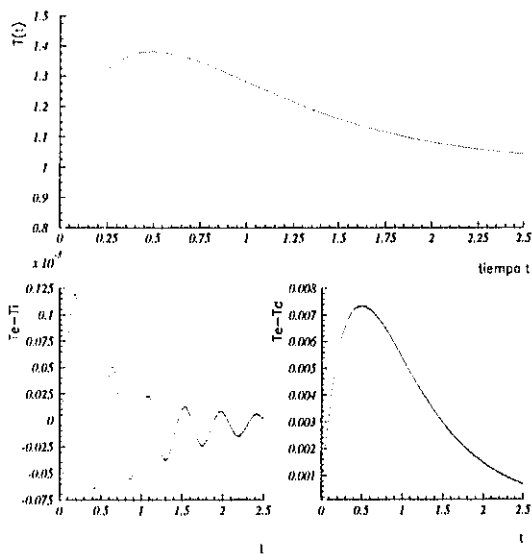


Figura 3.8: Momentos de f en proceso variable (I).

Evolución de $T(t_n)$ y diferencia entre el momento $\langle q^2 \rangle$ exacto T_e y el calculado con la solución integral T_i . La oscilación en torno a $T_e - T_i = 0$ se debe al ajuste iterativo de Ψ_n . La diferencia $T_e - T_d$ con T_d calculado con la solución en diferencias fd es mayor que $T_e - T_i$ en cualquier etapa de la evolución.

asintóticamente como el propuesto cuando t aumenta. Por esta razón se ha conservado explícitamente la dependencia en t de A y D a través de $\gamma(t)$. En particular, se han analizado procesos en los que γ no evoluciona lentamente en el tiempo, pudiendo tender a infinito a medida que aumenta t . Análíticamente el problema presenta de nuevo tres magnitudes conservadas. Si la función $\gamma(t)$ se halla acotada inferior y superiormente por constantes estrictamente mayores que cero, el cómputo de los elementos Q_{ij}^n en la n -ésima iteración no genera problemas, al no existir singularidad para ningún t_n en el argumento de la exponencial de (2.13); por ello serían válidas las conclusiones extraídas para el caso (3.22) análogas a los procesos de coeficientes independientes del tiempo. Sin embargo, si $\gamma(t)$ es una función estrictamente positiva y creciente en $]0, \infty[$, la situación cambia drásticamente. En primer lugar, la corrección en la desviación típica de la probabilidad de transición a tiempos cortos resulta inviable, ya que el término $\langle A^2 \rangle$ puede aumentar indefinidamente. Por otra parte, el argumento de la exponencial en P_τ es creciente en t , por lo que los términos Q_{ij}^n tienden a cero a medida que aumenta n ; la solución estacionaria del problema numérico es el vector nulo $\{f\} = [0, 0, \dots, 0]$ lo que muestra claramente que el procedimiento numérico integral no es válido, en tanto que no representa físicamente la situación esperada. Sólo para valores de t_n tales que $\gamma(t_n)\tau \leq 1$ P_τ resulta apropiada para la descripción del estado transitorio. Esencialmente este resultado se debe a que los errores cometidos al limitar la integración a un intervalo finito aumentan al crecer en el tiempo el valor medio $\bar{v} = v' - \gamma(t_n)\tau(v' - v_0)$ de la probabilidad de transición.

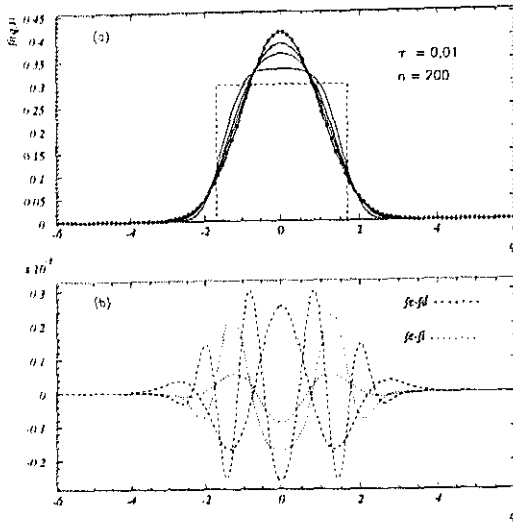


Figura 3.9: Proceso con A y D dependientes de $\exp(t)$ (II).

(a) Solución integral para el caso (3.23) en 200 iteraciones. (b) Diferencias entre la solución exacta f_e y las soluciones numéricas en diferencias f_d e integral f_i .

Es claro que esta misma situación puede aparecer en problemas físicos en los que $A(q, t)$ (y/o D) varíe con el tiempo de forma que tienda asintóticamente a una función $\gamma(t, q)$ estrictamente creciente en t para cada valor fijo de q . En tal caso, la resolución del problema simple (3.23) dispensará el tratamiento a seguir para procesos similares relativos a ecuaciones de Fokker-Planck de coeficientes dependientes del tiempo.

Puede demostrarse de forma sencilla que la utilización de P_τ conduce analíticamente a la solución del problema analizando la evolución de la condición inicial $f_0 = \delta(v - v_0)$ obteniendo analíticamente $f(v, n\tau)$. Si se procede al cálculo de los límites $\tau \rightarrow 0$ y $n \rightarrow \infty$ con $n\tau = t$ para $f(v, n\tau)$ se obtiene $f(v, t|v_0)$ coincidente con $P(v, t|v_0, 0)$ dada por (3.22). En definitiva, la probabilidad de transición a tiempos cortos utilizada anteriormente es válida para la resolución analítica del problema. En cambio, como se ha mostrado, P_τ no resulta apropiada para la aplicación del método numérico integral. Esto no significa que el procedimiento numérico estudiado en este trabajo no resulte aplicable a problemas con coeficientes de difusión y deriva variables en el tiempo. Sencillamente basta considerar que la probabilidad de transición a tiempos cortos no es efectiva para problemas análogos a (3.23) para cualquier valor finito de τ . En ese caso es necesario definir un propagador P_τ que se adapte a las características del nuevo problema. En particular, la nueva probabilidad de transición puede obtenerse siguiendo el método expuesto en la sección 2.2.2 con el operador auxiliar L_{FP}^* correspondiente al proceso de Ornstein-Uhlenbeck con γ constante, esto es, si $\gamma(t)(v' - v_0)\delta(v - v')$ se sustituye por $\gamma(t)(v - v_0)\delta(v - v')$. La probabilidad de transición

efectiva será ahora (3.10) que sólo involucra términos en $\exp(-\tau\gamma(t_n))$ siendo apta para la descripción del problema pues P_τ no decae a cero a medida que aumenta el número de iteraciones. Es obvio que la nueva probabilidad de transición coincide con el propagador habitual (2.13) a primer orden en τ . Así mismo, analíticamente puede obtenerse $f(v, t)$ con $f_0 = \delta(v - v_0)$ como se indicó anteriormente, mediante el estudio de la convergencia uniforme en $(\tau, 1/n) \rightarrow (0, 0)$ de $f(v, n\tau)$ manteniendo $n\tau = t$.

El algoritmo seguido para el avance temporal es análogo al descrito en casos anteriores. La integración simple por rectángulos se lleva a cabo ahora para aquellas iteraciones en las que $\tau^* = \gamma_n \tau$ satisface la relación (3.4) cambiando D por $(T_0 - v_0^2)/\gamma_n$, ya que siguen siendo válidos los argumentos aducidos para el problema de Wiener para la validez de la aplicación de la Regla Extendida del Punto Medio. En caso contrario los coeficientes Q_{ij}^n se determinarán integrando P_τ sobre v' en el intervalo $[v_j - \Delta v/2, v_j + \Delta v/2]$ si la n -ésima condición inicial f^n se construye según (2.31). La nueva probabilidad de transición conduce a la correcta descripción no sólo del régimen transitorio, sino de la situación estacionaria esperada para el problema continuo. En cambio, el esquema en diferencias finitas, al no depender la red espacial discreta del tiempo, resulta inapropiado para valores de $\tau\gamma_n$ excesivamente grandes, pues la matriz de evolución tiene todos sus elementos negativos a partir de cierto valor de n ; Esta situación genera valores negativos de f^n , para algunos f_i^n , dando lugar a una evolución no física.

En la figura 3.9 se muestra la evolución de la condición inicial (3.12) para $\gamma(t) = a \exp(at)$, $a > 0$. El comportamiento para otras funciones crecientes (incluso decrecientes)

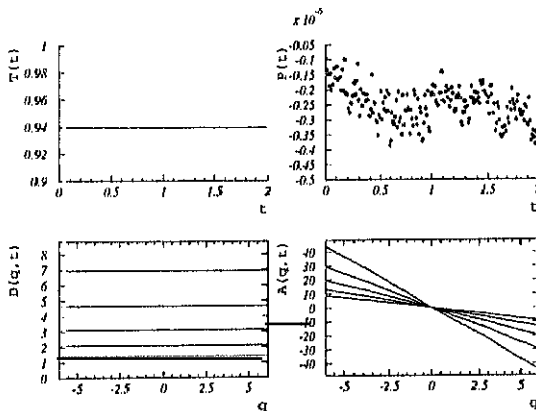


Figura 3.10: Momentos de f en proceso variable (II).

de t es análogo. La diferencia entre la solución verdadera f_e y la solución numérica integral f_i es menor a $f_e - f_d$ en cada etapa de la evolución y en cada punto de la red. f_d representa la solución dada por el esquema en diferencias.

Las conclusiones extraídas en la resolución del caso simple (3.23) son extensibles a otros problemas de coeficientes variables en los que existe una solución estacionaria $f_s(q)$ para f —en el sentido $f_s = \lim_{t \rightarrow \infty} f(q, t)$ —. Para este tipo de problemas es suficiente recurrir a

la factorización de A en la forma $A(q, t) = -D(q, t) [q - g_0(q, t)]$, por lo que $A\delta(q - q')$ se puede expresar como

$$A(q, t)\delta(q - q') = q D(q', t)\delta(q - q') + D(q', t)g_0(q', t)\delta(q - q')$$

que reduce el operador auxiliar L_{FP}^* a un operador del problema de Ornstein-Uhlenbeck en τ , de coeficientes constantes (ya que t se considera un parámetro fijo). Con ello, la expresión de P_τ será la correspondiente a la probabilidad de transición para este proceso, con las sustituciones $\gamma \rightarrow D(q', t)/\tau$, $\gamma \cdot (t - t') \rightarrow \tau D(q', t)/\tau$, $v_0 \rightarrow g_0(q', t)$ y $D \rightarrow 1$.

En general, el problema de Ornstein-Uhlenbeck variable da lugar a toda un clase de propagadores P_τ equivalentes en el límite $\tau \rightarrow 0$, si el operador L_{FP}^* es identificable con el operador L_{FP} de dicho proceso. En términos de la relación asintótica $A(q, t)/D(q, t)$ para q fijo y $t \rightarrow \infty$ pueden elegirse convenientemente las factorizaciones (2.21) que derivan en una EFP auxiliar de un proceso con $P(q, t + \tau|q', t)$ conocida que, para τ finito, se adapte al problema tratado como propagador a tiempos cortos.

3.4 Ecuaciones de Fokker-Planck no lineales.

Se ha estudiado la forma de abordar mediante el método integral numérico ecuaciones de Fokker-Planck ordinarias que rigen la evolución de la distribución de probabilidad en procesos markovianos. Se han sentado las bases para optimizar el modelo en aquellas ecuaciones de coeficientes A y D dependientes tanto de la variable espacial como del tiempo. Interesa ahora mostrar la efectividad del modelo numérico para las ecuaciones de Fokker-Planck que se han denominado *no lineales*. Estas ecuaciones presentan la forma de las ecuaciones ordinarias que han venido tratándose a lo largo de la exposición, con la salvedad de que A y D pueden depender de la propia función de distribución f mediante cualquier relación funcional. Desde el punto de vista de la teoría de los procesos estocásticos, tal dependencia puede ser entendida en virtud de ciertas propiedades de presencia de *memoria* en los procesos que definen las llamadas Ecuaciones Generalizadas de Langevin, para las variables microscópicas. En estos problemas, la relación de Chapman-Kolmogorov no tiene porqué ser satisfecha por la probabilidad de transición o probabilidad condicional $p(q, t|q', t')$ si bien existe una relación equivalente para la expresión del propagador $\Pi(q, t|q', t')$ que, en general, no se entiende como probabilidad de transición, según (2.4). En cambio, la relación de consistencia (2.6) se verifica para cualquier proceso que se interprete como surgido de una interpretación probabilística. En este sentido, se propone ahora aplicar los mismos argumentos sentados para ecuaciones lineales de Fokker-Planck sobre ecuaciones para f formalmente equivalentes a las primeras, en las que A y D son funciones de f .

La no linealidad se traduce en el hecho de que la evolución de la distribución puede depender de la condición inicial f_0 en todo instante t . Son numerosos los problemas de esta índole para los que existe solución estacionaria $f_s(q)$ obtenida al hacer tender a infinito el tiempo t , que puede incluso llegar a ser independiente de f_0 . Cabe ahora interrogarse sobre la posibilidad de que tales procesos puedan describirse numéricamente mediante el procedimiento integral que ha venido presentándose a lo largo de la exposición. En principio, como se ha contemplado a través del estudio de procesos variables (A y D dependientes de t) el comportamiento de la solución numérica para la descripción del régimen transitorio y del estado estacionario, si éste existe, es satisfactorio siempre que P_T se adecue al problema particular. Ello sugiere la posibilidad de que en procesos no lineales gobernados por una ecuación de la forma EFP, la evolución numérica de la distribución se comporte de forma análoga que la experimentada por f en procesos lineales variables. En verdad, el método es totalmente explícito, lo que implica el conocimiento de los coeficientes difusivos en el instante t_n para la $(n-1)$ -ésima iteración, de esta forma, el proceso no lineal equivale a un problema en el que A y D se conocen como funciones explícitas del tiempo. Sólo cabe esperar que la no linealidad no produzca una excesiva propagación de los errores de truncamiento. Como se ha estudiado, la función de autocorrelación numérica dirige el sistema hacia el comportamiento físico esperado, siempre que el problema original verifique ciertas propiedades relativas a la conservación de, al menos, el segundo momento de la distribución.

Se plantean a continuación dos problemas representativos de ecuaciones no lineales de Fokker-Planck. Para el primero existe solución estacionaria y además es posible conocer la función analítica $f(q, t)$, que se comparará con la solución numérica en cada etapa de la evolución, sin recurrir a ningún tipo de ajuste. El segundo ejemplo es formalmente

equivalente a una ecuación cinética de un 'plasma unidimensional': es una ecuación integro-diferencial definida sobre un operador que conserva el momento lineal (media de f) y la energía (segundo momento de la distribución.)

3.4.1 Proceso no markoviano con A dependiente de f .

En ciertos problemas físicos, tales como los fenómenos de transición de fases surgen ecuaciones claramente interpretables bajo la perspectiva de los procesos estocásticos no markovianos, que dan lugar a una ecuación para la evolución temporal de la función distribución de probabilidad f de marcado carácter no lineal en la forma

$$\frac{\partial f}{\partial t} = H \left[f, \frac{\partial f}{\partial q}, \int^q h(q, q') f(q', t) dq' \mid q, t, t_0 \right].$$

Resulta sencillo construir un simple modelo de caminata al azar (*random-walk*) con ciertos efectos de memoria o correlación temporal en el muestreo de las variables aleatorias ([13]). La dependencia en cada instante de la historia anterior experimentada por el proceso da lugar a las denominadas *Ecuaciones de Langevin Generalizadas* de las que pueden inferirse las ecuaciones integro-diferenciales que gobiernan la evolución de f en las variables macroscópicas. Existen algunos procesos de este tipo para los que es factible eliminar los efectos inducidos por la memoria, y consecuentemente, convertir el problema en otro equivalente puramente markoviano. En particular, se ha estudiado uno de estos procesos para el que la ecuación que gobierna la evolución temporal presenta la forma de una ecuación de Fokker-Panck de coeficientes dependientes de f . En particular, siguiendo la referencia ([13]) se ha optado por construir y resolver el problema

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial q} \left\{ -\gamma q - \lambda f - \frac{\partial}{\partial q} D_0 \right\} f(q, t) \quad (3.24)$$

que exhibe claramente la forma de (2.25) con $A = -(\gamma q + \lambda f)$ y $D = D_0$ constante. La presencia de f en el coeficiente de convección muestra la persistencia de ciertos efectos de correlación, o memoria, añadidos a la descripción microscópica de cierto proceso estocástico, similar al proceso de Ornstein-Uhlenbeck, al que se reduce (3.24) si $\lambda = 0$. Sin pérdida de generalidad, se ha tratado el problema anterior con $D_0 = 1$ y $\lambda = 1$, para $\gamma > 0$. Mediante una transformación integral similar a la transformada de Hopf-Cole, según

$$\begin{aligned} Q(q, t) &= \exp \left\{ \frac{\gamma}{2} q^2 + \int_{-\infty}^q f(u, t) du \right\} \\ f(q, t) &= \frac{\partial}{\partial q} \left\{ \ln \{ Q(q, t) e^{-\frac{\gamma}{2} q^2} \} \right\} \end{aligned}$$

es posible determinar la forma analítica de f si q se define sobre toda la recta real, cuando tanto la corriente de probabilidad J como f se anulan en los límites $q \rightarrow \pm\infty$. Bajo estas condiciones, la ecuación satisfecha por la nueva función $Q(q, t)$ es

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial q} \left[\gamma q - \frac{\partial}{\partial q} \right] Q(q, t), \quad (3.25)$$

independiente de f , lo que significa la eliminación de los efectos de memoria inducidos por la interpretación estocástica. Es evidente que la ecuación anterior representa un proceso de Ornstein-Uhlenbeck unidimensional de coeficiente inverso $-\gamma$ constante. Risken ([2]) muestra que la probabilidad de transición correspondiente a la ecuación anterior coincide con la probabilidad de transición $P_{-\gamma}^{O-U}(q, t|q', 0)$ para un proceso de Ornstein-Uhlenbeck con la sustitución $\gamma \rightarrow -\gamma$ que, a pesar de no presentar solución estacionaria, es útil para avanzar en el tiempo la condición inicial $Q(q, 0)$, esto es,

$$Q(q, t) = \int_{-\infty}^{\infty} P_{-\gamma}^{O-U}(q, t|q', 0) Q(q', 0) dq'$$

donde $Q(q, 0) = \exp\{\gamma q^2/2 + \int_{-\infty}^q f(u, 0) du\}$. En definitiva, notando por z el factor $e^{\gamma t}$, la solución a (3.24) es

$$f(q, t) = \frac{\gamma z}{z^2 - 1} \frac{\int_{-\infty}^{\infty} (q' - zq) e^{G(q, q')} dq'}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{G(q, q')} dq'} \quad (3.26)$$

donde el núcleo integral $G(q, q')$ viene dado por

$$G(q, q') = \int_{-\infty}^{q'} f(u, 0) du - \frac{\gamma}{2} \frac{q' - zq}{1 - z^2}$$

Así mismo, es posible derivar la expresión de propagador $\Pi(q, t|q', t')$ que, al igual que $f(q, t)$, depende de toda la historia de la evolución. La ecuación integro-diferencial verificada por Π presenta la forma de una EFP en la que la deriva A depende $\int f(q', t') \Pi dq'$. En particular, la dependencia en $f(q, t = 0)$ para la probabilidad de transición analítica $P = \Pi(q, t|q', 0)$

$$\Pi(q, t|q', 0) = e^{\frac{(zq - q')\gamma}{1 - z^2}} \frac{G(q, q')}{\int_{-\infty}^{\infty} G(q, u) du}^{-1}.$$

es evidente.

Si el coeficiente γ es positivo, cuando se procede al límite $t \rightarrow \infty$, se obtiene la solución estacionaria f_s dada por

$$f_s(q) = \sqrt{\frac{2\gamma}{\pi}} \frac{e^{-\gamma q^2/2}}{(e+1)/(e-1) + \text{fer}(q\sqrt{\frac{\gamma}{2}})} \quad (3.27)$$

que se torna independiente de la condición inicial $f(q, 0)$. Es sencillo verificar que (3.27) se deriva al resolver la ecuación homogénea para (3.24) asumiendo que existe f_s independiente de t .

El operador L_{FP} de la ecuación (3.24) sólo preserva la norma inicial de f a lo largo de toda la evolución. No es posible asegurar que, si la condición inicial $f(q, 0) = f_0$ tiene como momentos de primer y segundo orden p_0 y T_0 coincidentes con los de f_s , éstos se mantengan constantes para $t > 0$. En cambio, si la descripción numérica del estado estacionario es apropiada, los momentos T_n y p_n deben coincidir hasta cierto orden de aproximación con p_s y T_s atribuidos a los de la solución f_s . Por otra parte, al existir la distribución analítica $f(q, t)$,

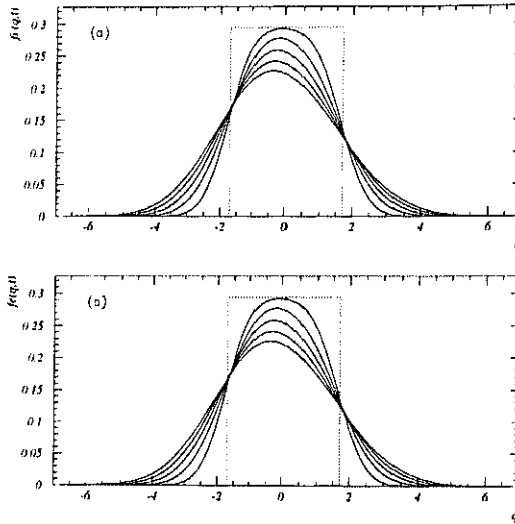


Figura 3.11: Solución integral y exacta en proceso no markoviano con $\gamma = 0$.

Evolución de la solución integral f_i hasta completar un tiempo de una unidad con $\tau = 0, 1$ y $\gamma = 0$. (b) Solución exacta f_e en las mismas etapas del gráfico anterior.

la comparación de los momentos de la solución numérica con los verdaderos es inmediata. Esta comparación permitirá estimar así mismo el orden de aproximación del método integral para problemas no lineales.

La solución numérica se obtiene siguiendo el procedimiento presentado para la resolución del problema de Ornstein-Uhlenbeck. La probabilidad de transición a tiempos cortos utilizada ha sido la distribución gaussiana habitual (2.13) sin ningún tipo de corrección. Podría usarse para P_τ la probabilidad P correspondiente al proceso de Ornstein-Uhlenbeck (3.10), cuando el valor de la media v_0 se sustituye por $f(q', t)$. De esta forma se mejoraría notablemente el resultado para cada iteración pues al ser f una función acotada, P_τ se adaptaría casi exactamente al problema particular.

Se ha investigado la evolución de una condición inicial tipo (3.12) en los mismos términos que los establecidos para el estudio de ecuaciones lineales. El caso $\gamma = 0$ (figura 3.11) no origina solución estacionaria, por ello se fija un valor máximo de $t = n\tau$ para contemplar la aproximación entre la solución numérica y la analítica en función del número de iteraciones n . Basta elegir el paso temporal del orden de $t/10$ para que la evolución de f^n resulte paralela a la de la solución analítica. La diferencia entre ambas soluciones disminuye, como es obvio, al aumentar el número máximo de iteraciones tendentes a alcanzar el valor final de t , siempre que esto no reduzca excesivamente el valor de τ , lo que obligaría a refinar la red si se desea aplicar una integración simple por rectángulos con $Q_{ij}^n = P_{ij}^n \Delta q$. Véase la figura 3.11. Al igual que en los problemas simples anteriores, la estimación de las normas

$\sum_i P_{ij}^n \Delta q$ marca el índice de aplicabilidad para tal integración, si cada norma se aproxima a la unidad hasta un cierto orden. En caso contrario, a pesar de renormalizar cada elemento de \mathcal{Q} , la evolución física se desvirtúa, no convergiendo la solución numérica a la verdadera; es necesario entonces recurrir a la representación de Q_{ij}^n con funciones error según (2.34) o bien, refinar la retícula espacial como sugiere la relación (3.4). La matriz de evolución \mathcal{Q} es $(2M+1)$ -diagonal, donde M denota el número de subintervalos de la red discreta adyacentes a uno dado, hacia los cuales la difusión resulta efectiva. El valor de M está en función del ancho en el incremento temporal, habitualmente basta tomar $M = 3$ ó $M = 4$ para un valor de τ físicamente razonable, que se ajustará en el ejercicio de la computación numérica. Sin embargo, para este problema y casi de modo general, puede darse cualquier valor de τ menor que el tiempo de relajación estimado a priori y dejar que M se ajuste en cada programa. El efecto de esta situación es similar al observado para esquemas en diferencias finitas implícitos que resultan estables de forma incondicional. En este sentido, es preciso señalar que con estos últimos esquemas pueden generarse valores espúreos (negativos o no coherentes con la difusión) para f^n en alguna etapa de la evolución, al igual que ocurre con el proceso puramente difusivo. Este problema, en cambio, no aparece nunca en la solución numérica integral, que preserva la positividad y la norma de f_0 .

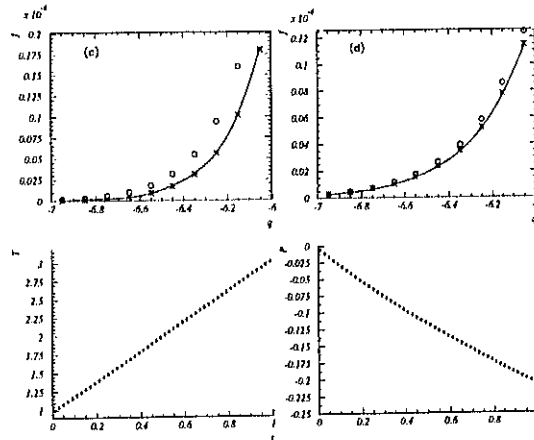


Figura 3.12: Comportamiento de las colas de f en proceso con $\gamma = 0$.

Con el propagador P_τ el comportamiento de las colas de la distribución es semejante al presentado por la solución verdadera, figura 3.12, mientras en el esquema en diferencias las colas se adelantan en las primeras iteraciones, lo que afecta a la estimación del tiempo de relajación. Esta situación se ha apreciado también en los problemas tratados anteriormente. Es evidente que la aproximación de P_τ a la función de Green real $P(q, t + \tau|q, t)$ puede resultar más eficiente que la aproximación de orden τ^2 dada por el esquema en diferencias. En la figura 3.12 los símbolos * se refieren a la solución integral. Los círculos dan los valores de f_j aportados por el esquema en diferencias, mientras que la línea continua representa la función verdadera f_e . El desfase se corrige al aumentar el número de iteraciones. Los

momentos $P(t_n)$ y $T(t_n)$ — en círculos — coinciden prácticamente con los reales (línea continua sobrepuesta).

Si el coeficiente γ es distinto de cero, el problema continuo presenta la solución estacionaria (3.27), en el sentido de que existe el límite $\lim_{t \rightarrow \infty} f(q, t) = f_s(q)$. En este caso, el sistema se deja evolucionar manteniendo τ constante y aumentando el número n de iteraciones. El régimen transitorio se describe de forma apropiada para cada $t_n = n\tau$ siempre que τ sea como máximo del orden de un décimo del tiempo de relajación $t_r \approx 1/\gamma$. Al no presentarse ninguna singularidad en A ni en D y por estar acotados en $(-v_m, v_m) \times (0, n\tau)$, los elementos Q_{ij}^n se mantienen diferentes de cero para al menos un índice j , con i , fijo en cada iteración; en consecuencia, la solución numérica estacionaria será diferente del vector nulo $\{f\} = [0, 0, \dots, 0]$. Si se eleva el número de iteraciones, P_τ propende a ser constante en n , ello indica que f^n tiende hacia una solución numérica estacionaria f_s^n . En estos términos, el comportamiento del sistema se aproxima al observado en problemas con A y D independientes del tiempo, para los que existía solución numérica integral estacionaria si ésta se daba para el problema continuo. La diferencia entre f_s^n y f_s se reduce a medida que se disminuye τ , como es evidente; no obstante se aprecia una excelente convergencia incluso para τ del orden de $1/2\gamma$ que se reduce según se aumenta el número de pasos temporales. La convergencia hacia la solución estacionaria verdadera se mejora de forma notable si a partir de cierta iteración para la cual $n\tau \sim 1/\gamma$, se procede al ajuste iterativo de f^n a través de la función de autocorrelación numérica Ψ_n haciendo coincidir con T_0 el valor esperado del segundo momento T_s para la solución analítica estacionaria continua, que puede derivarse a partir de la ecuación homogénea del problema continuo (figura 3.13).

Siguiendo el procedimiento presentado para el estudio de (3.24) se han investigado otros casos de procesos no markovianos en los cuales D también depende de $f(q, t)$. Para todos ellos el comportamiento de la solución numérica integral es semejante al observado para problemas en los que los coeficientes difusivos son dependientes de t y q como funciones explícitas de estas variables.

En general, ante la elección de un propagador adecuado, los procesos no lineales formalmente identificables con ecuaciones diferenciales de Fokker-Planck ordinarias, son abordables mediante el procedimiento numérico integral bajo las mismas condiciones que estas últimas. El propagador P_τ óptimo contribuye a mejorar la convergencia hacia la solución verdadera. Tal elección queda condicionada a un estudio previo estimativo del comportamiento de A y D a medida que aumenta t .

3.4.2 Ecuación integro-diferencial con $\langle q \rangle$ y $\langle q^2 \rangle$ constantes.

El interés en el estudio del problema anterior subyace en la posibilidad que presta la existencia de solución analítica para refrendar la aplicabilidad del modelo numérico integral, estimando el orden de aproximación y la posible convergencia de la solución numérica. En cambio, en este proceso el operador L_{FP} no preserva los valores iniciales de los dos primeros momentos de la distribución, en los que se concentra, esencialmente, la información sobre el sistema en problemas con mayor significado físico. A este efecto, se han estudiado algunos procesos en los que tal operador presenta las mismas características que los operadores colisionales surgidos en estudio cinético de sistemas en Física Estadística. El carácter no lineal de las ecuaciones cinéticas asemeja el tratamiento de dichos problemas al dispensado a

(3.24) de la sección anterior. Bajo las condiciones no excesivamente restrictivas impuestas para el estudio de procesos variables, la aplicabilidad del método resulta evidente, como se ha venido mostrando en los casos precedentes. No obstante, interesa evaluar ahora la evolución de cantidades conservadas en problemas no lineales para los cuales sea posible derivar, al menos analíticamente, la solución estacionaria a fin de comparar con la obtenida solución numérica. Se ha pretendido así mismo, generar un conjunto de problemas formalmente equivalentes a los problemas físicos hacia los que se encamina este estudio y que no presenten como solución de equilibrio una maxwelliana. Este objetivo se fundamenta en el hecho de que todos los procesos abordados hasta aquí presentan soluciones estacionarias tipo distribución de Gauss o distribución uniforme — (3.1), (3.8), (3.16) ... — lo que puede inducir a pensar, en virtud de la expresión de P_T utilizada en cada caso, que el propagador numérico condiciona la evolución hacia tal tipo de solución.

En general, siguiendo con el análisis unidimensional, se han investigado ecuaciones no lineales de Fokker-Planck, en las que tanto A como D dependen de forma integral de $f(q, t)$ en la forma

$$A(q, t) = a(q) * f(q, t) \quad \text{y} \quad D(q, t) = d(q) * f(q, t), \quad (q, t) \in \mathfrak{R} \times \mathfrak{R}^+ \quad (3.28)$$

donde $*$ denota la integral de convolución

$$g(q) * h(q) = \int_{-\infty}^{\infty} g(q - q') h(q') dq'$$

Si tanto f como la corriente de probabilidad J se anulan en los extremos $q \rightarrow \pm\infty$, las ecuaciones para el movimiento de los momentos $p(t) = \langle q \rangle(t)$ y $T(t) = \langle q^2 \rangle(t)$ vienen dadas por

$$\begin{aligned} \frac{dP}{dt} &= \int [a(q) * f(q, t)] f(q, t) dq \\ \frac{dT}{dt} &= \int 2[d(q) * f(q, t) + qa(q) * f(q, t)] f(q, t) dq \end{aligned} \quad (3.29)$$

de lo que se desprende que si se eligen convenientemente las funciones a y d los segundos miembros de las relaciones anteriores pueden ser idénticamente nulos, lo que conlleva la constancia de p y T a lo largo de todo el proceso evolutivo. En este caso, sí es ortodoxo afirmar que el operador

$$\mathbf{L}_{FP} = -\frac{\partial}{\partial q} \{a(q) * f(q, t) - \frac{\partial}{\partial q} d(q) * f(q, t)\}$$

es un operador conservativo, en tanto que preserva los valores iniciales de los dos primeros momentos de la distribución $f_0(q)$, identificables, salvo constantes, con el momento lineal y la energía de un sistema físico. En particular, basta tomar

$$\begin{aligned} a(q) &= -\lambda q h(q) \\ d(q) &= -\lambda \frac{1}{2} q^2 h(q) \end{aligned}$$

— con $h(q)$ cualquier función par en q — para que se verifiquen las propiedades de conservación aludidas.

En particular se han elegido para esta sección dos problemas representativos de ciertas situaciones de interés y que se exponen a continuación.

A.- Si $h(q)$ se identifica con la unidad los coeficientes de difusión y deriva vienen representados por

$$A(q, t) = -2 \int (q - q') f(q', t) dq' \quad \text{y} \quad D(q, t) = \int (q - q')^2 f(q', t) dq'.$$

Como $p(t)$ y $T(t)$ permanecen constantes las integrales anteriores equivalen a las expresiones $A = -2(q - p_0)$ y $D = (q - p_0)^2 + T_0 - p_0^2$, que eliminan el carácter no lineal del problema. Sin embargo, se ha resuelto la correspondiente Ecuación de Fokker-Planck entendiendo el caso como no markoviano, es decir, recalculando en cada iteración las funciones A y D . Con la finalidad de comparar las soluciones numéricas con las obtenidas tratando el problema como lineal también se ha resuelto el problema a partir de las expresiones analíticas (figura 3.14) para los coeficientes difusivos. Se intenta así contemplar el efecto de la progación de errores en el cálculo alineal para las soluciones numéricas integral y en diferencias finitas. El problema presenta solución analítica ya que, mediante una transformación lineal de la variable q , puede reducirse a uno de los procesos estacionarios de Markov expuestos por E. Wong en la referencia ([14]). No obstante, interesa en esta sección dilucidar si la descripción numérica del régimen estacionario es adecuada para el problema no lineal continuo, analizando tanto la forma funcional de la solución estacionaria f_s^n , como la evolución de los momentos p_n y T_n en los que se concentra la información de cierto sistema físico.

Tomando $p_0 = 0$, sin que ello suponga pérdida de generalidad, la solución analítica estacionaria presenta la forma de una distribución tipo Pearson [12] según

$$f_s(q) = \frac{2}{\pi} \frac{\sigma^{\frac{3}{2}}}{[q^2 + \sigma^2]^2}; \quad \sigma^2 = T_0$$

donde T_0 es el valor del momento de segundo orden en la distribución inicial $f(q, 0)$. Es sencillo probar que, además de la solución estacionaria anterior y de la solución trivial $f(q, t) = 0$, la función $f = \delta(q) - \delta(q - p_0)$ cuando $p_0 \neq 0$ — es solución del problema no lineal. Este hecho resulta interesante para interpretar los resultados obtenidos en la resolución numérica del problema.

Si la ecuación de Fokker-Planck se aborda en su versión lineal, la solución numérica integral confluye a la solución estacionaria f_s evaluada sobre los puntos de la retícula espacial, tras ajustarse en pocas iteraciones el valor de la autocorrelación Ψ_n . En cambio, el esquema en diferencias habitualmente utilizado en problemas anteriores, deriva en una solución estacionaria que difiere ligeramente de la analítica, como consecuencia de la inevitable variación del momento T_n a lo largo de la evolución. La diferencia resulta tanto más apreciable cuanto mayor es el paso temporal τ y el ancho espacial Δq pues la suma $\sum_i q_i^2 f_i^2 \Delta q$ para el cálculo de T_n difiere de T_{n-1} en un resto del orden de $\tau \Delta q (q_1 D_1 f_1 - q_N D_N f_N)$ que es significativo, al ser qD proporcional a q^3 y

f^n a $1/q^4$. Por el comportamiento de $|A|$ y D como funciones crecientes en q , el efecto de variación contemplado para T_n es más acentuado que en los problemas lineales tratados en páginas anteriores. La solución numérica para el esquema en diferencias finitas se estabiliza dando lugar a una solución estacionaria en la que el momento T difiere del calculado con f_s sobre la red discreta (figura 3.14).

Cuando el problema se resuelve en su versión no lineal, computando en cada iteración las integrales que definen los coeficientes A y D , la evolución de la solución numérica integral es pareja a la contemplada en el cálculo precedente. El concurso de la autocorrelación redirige el proceso evolutivo hacia la confluencia a la solución estacionaria analítica f_s sobre el intervalo $] -q_m, q_m[$, que representa la recta real en el caso discreto. La repercusión del carácter no lineal es, a efectos prácticos, inapreciable. A pesar de que la variación de A y D sea significativa en toda la evolución, los efectos originados por la no linealidad resultan irrelevantes para el cálculo de las exponenciales involucradas en la determinación de las tasas Q_{ij}^n en cada paso temporal. Por otra parte el procedimiento integral es totalmente explícito, lo que conlleva incluir una sola vez por iteración los posibles errores generados por la alinealidad. En cambio, en el esquema en diferencias estos errores pueden ser acumulativos durante un sólo paso al contabilizarse de forma lineal en las aproximaciones de las derivadas, en el predictor y el proceso de inversión matricial. De hecho, se aprecia que la *pérdida de la 'energía' inicial* T_0 aumenta de forma lineal con n , tendiendo al valor $T_n = 0$, sin estabilizarse como sucede con la solución homóloga en el problema lineal, véase la figura 3.15. La información relativa a los momentos iniciales se desvirtúa notablemente. Es interesante notar que la solución numérica para el esquema en diferencias tiende ahora hacia

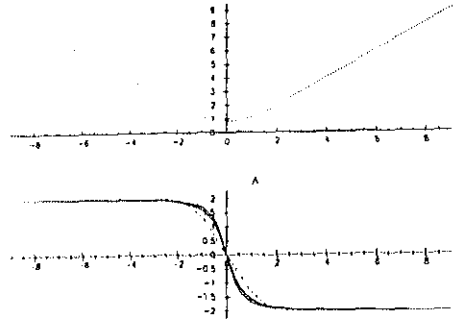
$$f_i^n = \frac{\delta_{i_0, i}}{\Delta q}$$

(donde i_0 marca el índice para el cual q_i toma el valor $q_i = 0$), que representa la forma discreta de la función δ de Dirac, solución estacionaria matemática del problema continuo que carece de significado físico.

B.- Como segunda aplicación al estudio de procesos no lineales equiparables a ecuaciones cinéticas en la Física Estadística, se ha optado por elegir para $h(q)$ en (3.30) la función $h = (2|q|)^{-1}$, con lo que A y D (figura contigua) vienen dados por las relaciones

$$A(q, t) = - \int \text{sig}(q - q') f(q', t) dq' \quad \text{y} \quad D(q, t) = \frac{1}{2} \int |q - q'| f(q', t) dq'$$

donde $\text{sig}(z)$ representa la función *signo* de z con $\text{sig}(0) = 0$.



Este problema unidimensional es formalmente equivalente a la ecuación de Fokker-Planck en la Física del Plasma, de hecho A , D y la distribución f se relacionan en términos de las expresiones

$$\frac{\partial A}{\partial q} = -2f, \quad \frac{\partial D}{\partial q} = -\frac{1}{2}A, \quad \text{y} \quad \frac{\partial^2 D}{\partial q^2} = f, \quad (3.30)$$

como puede sentarse fácilmente sin más que notar que $\partial \text{sig}(q-q') / \partial q = 2\delta(q-q')$. De nuevo se procede a determinar la solución estacionaria analítica que habrá de incluir en sí misma los momentos p_s y T_s coincidentes con los iniciales. Si se admite que f tiende a una función $f_s(q)$ a medida que t tiende a infinito, la ecuación de Fokker-Planck homogénea para las funciones estacionarias A_s y D_s , con la anulación de la corriente de probabilidad en $q \rightarrow \pm\infty$ y las propiedades (3.30), sugieren que f_s ha de tener la forma $f_s = C_1 / [(q - p_0)^2 + C_2]^{\frac{3}{2}}$ donde los coeficientes C_m son constantes. Si f_s admite la expresión anterior, una constante se determina por la condición de normalización, mientras que la otra (C_2) debería ser tal que el momento de segundo orden T_s coincidiera con T_0 , pero ello no es posible, ya que la integral de $q^2 f_s$ diverge. En consecuencia, la solución estacionaria debe presentarse como un proceso al límite de cierto parámetro positivo ϵ tal que (con $p_0 = 0$)

$$f_s(q) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{\Gamma(\frac{3}{2} + \epsilon)}{\sqrt{\pi}\Gamma(1 + \epsilon)} \frac{(2\epsilon T_0)^{1+\epsilon}}{[2\epsilon T_0 + q^2]^{\frac{3}{2} + \epsilon}} \quad (3.31)$$

preserva el valor de $T_s = T_0$.

En verdad, la distribución estacionaria f_s dada por la expresión anterior es coincide con la función $\delta(q)$ de Dirac en una representación tal que el momento T no es nulo. En el problema discreto esto se traduce en una evolución ha de alcanzarse una solución estacionaria ajustable a (3.31) para algún valor finito de ϵ , debido principalmente a la limitación de la red. De hecho, se observa que la función numérica integral f^n tiende a una función f_s^n del tipo mencionado, conservando el valor inicial de T_0 mediante el concurso de la autocorrelación Ψ_n , que se estabiliza en un valor cercano a la unidad;

f_i^n es una función piqueada de media nula y desviación T_0 . El comportamiento de esta solución es semejante a la observada en problemas para ecuaciones de Fokker-Planck lineales relativas a los procesos de Markov.

La solución numérica obtenida por el esquema en diferencias habitual se comporta de modo análogo a la presentada para el caso anterior. El vector $\{f^n\}$ tiende de nuevo a $f_i^n = \delta_{i_0,i} / \Delta q$ que equivale en el problema discreto a la función $\delta(q - 0)$, solución particular para el caso continuo. En cambio, esta solución deriva en un valor prácticamente nulo para el momento T_i al decrecer T_n de forma casi lineal. A pesar de que f_i^n se presta a cierta interpretación coherente con la naturaleza del problema verdadero que representa, la evolución de la solución numérica en diferencias tiene sentido físico, en tanto que ésta no degenera en la función δ en la forma esperada, al no mantener constante el valor de T_0 .

Como resumen de lo expuesto pueden observarse los gráficos de 3.16, en los que se exhibe la evolución ambas soluciones numéricas y de T_n . Es obvio que el propagador a tiempos cortos P_τ de (2.13) no conduce a una distribución gaussiana si las características del problema así lo imponen. La presencia de A y D en P_τ contribuye a que ésta se adapte a las condiciones de cada caso.

Un comportamiento similar se contempla para las soluciones numéricas dadas por esquemas en diferencias sobre problemas físicos reales en los que el estado estacionario viene representado por una función que fluctúa en torno a la distribución maxwelliana de equilibrio. En estos problemas f decae a cero exponencialmente en $|q|^2$ por lo que el efecto 'disipativo' del esquema numérico es menos patente que en los problemas A y B. Sin embargo, tras un gran número de iteraciones la influencia de la incorrecta evaluación en los momentos p y T puede inducir a comportamientos no físicos del sistema. La solución numérica integral, por su parte, se comporta de modo similar al contemplado en los problemas lineales ordinarios, siendo aplicable de igual modo la función de autocorrelación numérica Ψ_n si ésta fuera necesaria.

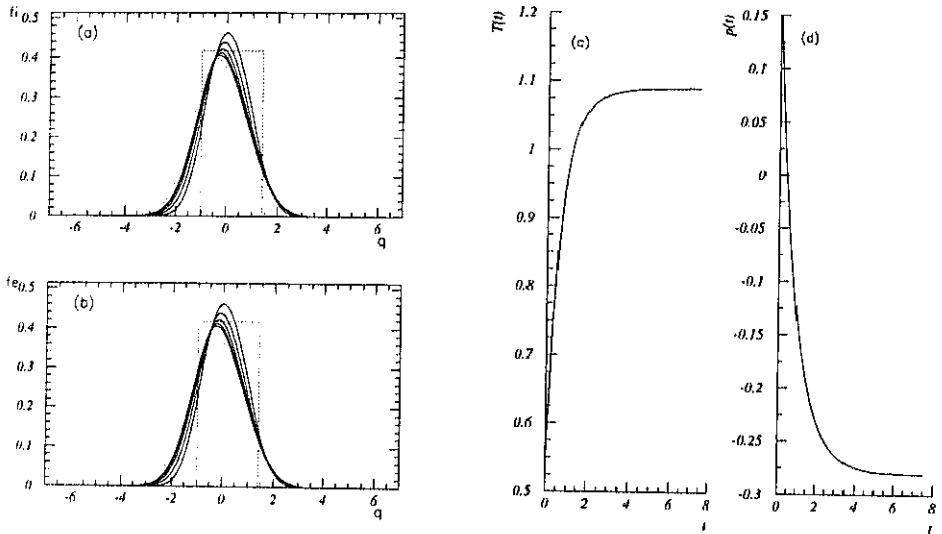


Figura 3.13: Solución integral en proceso no markoviano con $\gamma = 1$.

(a) solución numérica integral con $t = 2$ y 200 iteraciones para $\gamma = 1$. (b) solución analítica en las mismas etapas que (a). (c) y (d) evolución de los momentos $T(t_n)$ y $P(t_n)$ en 1000 iteraciones. La diferencia con los momentos verdaderos es menor de 10^{-5} unidades en cada etapa.

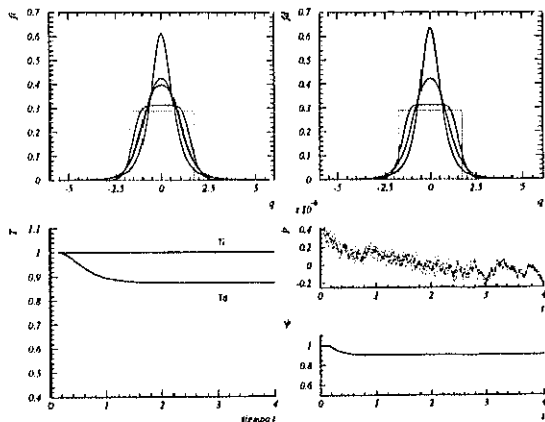


Figura 3.14: Ecuación integro-diferencial (I) sin recalculer A y D.

Soluciones numéricas según los esquemas integral-subíndice i - y en diferencias $-d$ - para $A = -2q$ y $D = q^2 + T_0$ con $T_0 = 1$. El paso temporal es $\tau = 0,05$ y $\Delta q = 2 \times 10/401$, sobre $[-10, 10]$. f_i y f_d se muestran sólo sobre $[-5, 5]$. $T(t)$ permanece prácticamente constante para la solución integral (T_i) mientras que T_d disminuye hasta estabilizarse en un valor menor que la unidad. Las variaciones de P son análogas en ambos esquemas y entran dentro del margen de error numérico.

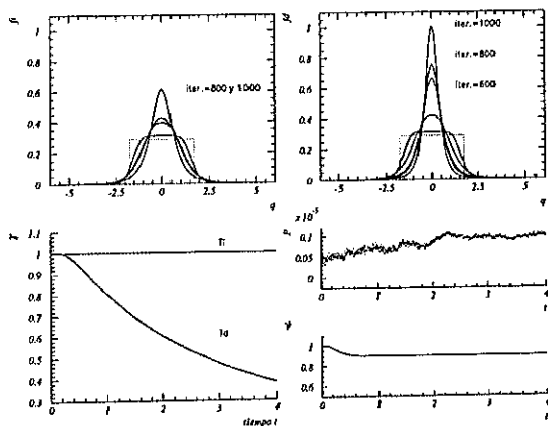


Figura 3.15: Ecuación integro-diferencial (I) con efectos no lineales.

Los mismos parámetros del gráfico anterior para el problema en que A y D se recalculan en cada paso temporal. f_d se hace más piqueada en torno al origen a medida que T_d disminuye. El comportamiento de la solución numérica integral f_i es idéntico al mostrado en el caso anterior.

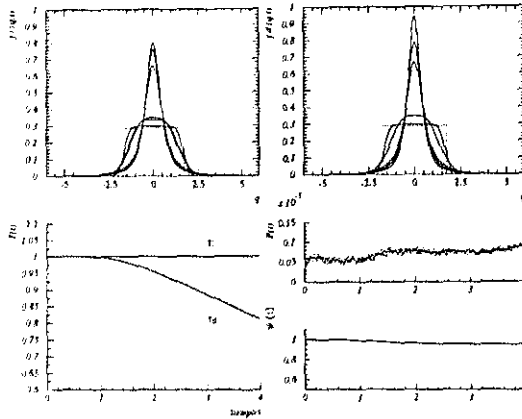


Figura 3.16: Ecuación integro-diferencial (II).

Comportamientos de f_i y f_d con los mismos parámetros que los usados en el caso A. Nuevamente, el carácter no lineal de A y D hace que T_d disminuya a medida que aumenta el número de iteraciones.

3.5 Operatividad del Método. Conclusiones.

En este capítulo se han establecido las bases para la operatividad del Método Numérico Integral para ecuaciones de Fokker-Planck, mediante la resolución de problemas particulares representativos de una amplia extensión de posibles procesos físicos de interés. La comparación entre las soluciones numérica y analítica ha permitido la deducción de propiedades esenciales, con carácter general, que apoyan la validez del procedimiento propuesto por nuestro grupo. Como conclusión y resumen se presenta seguidamente una lista de pautas de actuación encauzadas hacia la mejora de la operatividad del método integral.

- 1.- El esquema numérico de avance temporal se fundamenta en la ecuación de evolución para la función de distribución (2.6), lo que concede al planteamiento computacional pleno significado físico. La expresión del propagador P_τ no es única, puede construirse toda una familia de probabilidades de transición equivalentes que conducen a la solución analítica para el paso temporal τ tendiendo a cero. Por el carácter finito de τ conviene elegir un propagador que se adapte a las características del problema particular en estudio y que puede tomarse de entre aquéllos correspondientes a ecuaciones de Fokker-Planck lineales suficientemente estudiadas en la literatura, siempre que sea posible identificar los parámetros propios del problema con los del problema auxiliar, según el procedimiento descrito en la sección 2.2.2. No obstante, la probabilidad de transición habitual para el operados de Fokker-Planck (2.13) es aplicable a la inmensa mayoría de procesos físicos, especialmente si A y D son independientes del tiempo.
- 2.- El procedimiento numérico de integración, mediante la Regla Extendida del Punto Medio, permite una interpretación física clara sobre los términos Q_{ij} y f_i^n del esquema discreto. Esta interpretación enriquece el significado físico del procedimiento, ya que los elementos de la matriz Q se interpretan como la proporción de partículas que experimentan la transición del punto g_j a g_i en espacio de fases. La conservación del número de partículas es claro si se tiene en cuenta que P_τ representa una distribución de probabilidad condicional normalizada a la unidad en el dominio de sus variables. Esta propiedad se traduce en el requisito $C_j = \sum_i Q_{ij}^n = 1$. Conviene en cada problema evaluar la norma C_j para cada índice j . Si ésta primera norma coincide con la unidad, o se aproxima a ésta hasta cierto orden, la integración por rectángulos resulta aplicable, siempre que τ no sea excesivamente reducido, en cuyo caso conviene dar otra expresión para Q_{ij}^n , derivada a priori analíticamente según (2.34). En todo caso, conviene renormalizar cada Q_{ij} dividiendo por C_j para problemas en los que se simula la extensión a toda la recta real en q , así se atenuarán los efectos de limitación de la red a un intervalo finito.
- 3.- La preservación de la norma unidad del vector f^n y el requisito de que cada Q_{ij}^n de la matriz de evolución se mantenga menor o igual que la unidad, contribuyen de forma decisiva a la estabilidad del método, incluso para problemas con coeficientes variables en el tiempo o problemas no lineales.
- 4.- Las condiciones de frontera quedan incluidas en la probabilidad de transición a tiempos cortos, cuando la representación de la función δ de Dirac es coherente con las

condiciones de cada problema. En particular, puede elegirse para $\delta(q - q')$ la representación habitual en series de Fourier que recojan las condiciones de frontera del caso estudiado. En función de τ estas series serán válidas en las cercanías de las fronteras, si bien, puede recurrirse a la probabilidad de transición ordinaria para puntos interiores. De nuevo, la tasación de las normas C_j se utiliza como índice de medida para la aplicabilidad de uno u otro propagador. De esta forma se reduce el tiempo de computación, si el número de sumandos en cada serie es elevado. El análisis estimativo de la probabilidad de transición permite inferir el número de términos Q_{ij} necesarios para definir la matriz de evolución. Basta tomar $2M + 1$ elementos ($M \sim 3, 4$) en la forma $Q_{i,i-M} \dots Q_{i,i+M}$ para que q_i esté en un entorno q_j de radio $r \sim \sqrt{(MD_j\tau)}$ con probabilidad próxima a la unidad.

- 5.- Se han presentado problemas con A y D dependientes del tiempo, para los que existe la distribución $f(q, t \rightarrow \infty)$ en los que el propagador a tiempos cortos (2.13) no resulta efectivo al ser los coeficientes difusivos proporcionales a funciones monótonas crecientes en t . En estos casos, la probabilidad de transición a tiempos cortos ha de adaptarse al problema particular. Con este fin se ha mostrado la posibilidad de reducir el operador auxiliar L_{FP}^* que define P_τ a un operador identificable con el correspondiente al de un proceso de Ornstein-Uhlenbeck variable (3.19), cuando se elige convenientemente el conjunto de factorizaciones (2.21). Este procedimiento es aplicable a numerosos problemas físicos en los que la razón A/D tiende asintóticamente a q a medida que la variable espacial crece. En cualquier caso, es esencial que P_τ sea consistente con la ecuación diferencial del caos continuo, lo que se asegura siempre que se satisfagan las propiedades de la sección (2.2.1). Hay que señalar que el método utilizado para la integración espacial ha de ser consistente con la ecuación integral de evolución (2.9), no ya con la ecuación diferencial problema, como ocurre con esquemas en diferencias.
- 6.- El concurso de la función de autocorrelación numérica Ψ_n propicia la adecuación de la probabilidad de transición a cada problema cuando se conoce a priori la ley del movimiento de, al menos, uno de los momentos de la distribución. De este modo, el propagador utilizado se interpreta como variable en el tiempo y ajustable no sólo a las características de la ecuación de Fokker-Planck en estudio, sino también como coherente con la discretización espacial. La función Ψ no degenera las propiedades del sistema, al representar una corrección de segundo orden en τ sobre P_τ (no sobre L_{FP}^*).

La oscilación de Ψ es menor si P_τ aproxima de forma óptima al propagador verdadero. Cabe señalar que la inclusión de Ψ no afecta a la positividad de los Q_{ij} ni, en consecuencia al carácter positivo de la distribución inicial $f(q, 0)$. Nótese que una corrección de este tipo para un esquema numérico en diferencias puede originar una evolución no física, ya que Ψ_n es sustractiva respecto de A en algunas etapas de la evolución. Es preciso subrayar que P_τ es siempre positiva para cualesquiera funciones A y D por lo que Q es una matriz de elementos positivos. Este rasgo, en cambio, no se asegura para esquemas en diferencias finitas.

- 7.- El método integral es esencialmente explícito, el comportamiento de la solución numérica es equiparable al observado en los esquemas en diferencias implícitos más solventes y

conocidos en la literatura. La utilidad del mismo es patente en problemas no lineales, especialmente para casos con más de una dimensión en q , al no ser necesario recurrir a la inversión de matrices de evolución, procesos que hacen difícil o imposible la estimación de la propagación de errores. Por otra parte, la convergencia hacia la solución verdadera es óptima a medida que se aumenta el número de iteraciones, si bien esta propiedad es función de la expresión tomada para P_{τ} .

La flexibilidad en la elección del propagador posibilita la mejora en la descripción de los estados transitorio y estacionario. La experiencia adquirida por nuestro grupo en la investigación del método, corrobora que el mismo es aconsejable para la resolución de ecuaciones no lineales de Fokker-Planck, en los que existan magnitudes conservadas. El hecho de preservar constante el segundo momento de la distribución propicia la evolución física aceptable del problema continuo que intenta representar.

Bibliografía

- [1] Lax M., *Rev. Mod. Phys.* 32,25(1960) (a),38, 359(1966)(b) y 38,541(1966) (c).
- [2] H. Risken: *The Fokker-Planck Equation*, 2nd. ed., Springer Ser. Synergetics, Vol. 18 (Springer, Berlin, Heidelberg, New York) 1989
- [3] N.G. Van Kampen: *Stochastis Processes in Physics and Chemistry*, 4rd reprint (North-Holland, Amsterdam, New York, Oxford 1985).
- [4] C. W. Gardiner: *Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry and Natural Sciences*, Springer Ser. Synergetics, Vol. 13 (Springer, Berlin, Heidelberg, New York) 1987
- [5] Martínez Dopico, F. C.: *Métodos Numéricos para Ecuaciones de Fokker-Planck*, Tesis Doctoral, Universidad Complutense de Madrid, 1992.
- [6] Soler, M., *Phys. Lett. A*140, 373,377, (1989)
- [7] Martínez F. C. and Soler M., *Eur. J. Mech. B/Fluids*, 11,555(1992).
- [8] Soler M., Martínez F. C., Donoso J. M., *J. St. Phys.*, 69, 813(1992).
- [9] G.E. Uhlenbeck and L.S. Ornstein, 1930, *Phys. Rev*, 36, 823.
- [10] I.S. Gradshteyn, I.M. Ryzhik: *Tables of Integrals, Series and Products*, Academic Press Inc. London(1981).
- [11] W. Feller: *An Introduction to Probability Theory and Its Applications* (Wiley, New York, 1971).
- [12] E.W. Montroll and B. West: *On an Enriched Collection of Stochastic Processes* (North-Holand, Amsterdam, 1975)
- [13] Hara, H., *Z. Physik B*36, 369(1980)
- [14] Wong E., *Am. Math. Soc. Proc. of 16th Symp. on App. Math.* p. 264 (1964)

Parte II

**Aplicación a la Física del
Plasma**



Capítulo 4

Aplicación al Plasma Isotrópico.

Fijadas las bases que propician la operatividad del método integral, se procede en este capítulo a la aplicación del mismo para el estudio de sistemas físicos de interés, representados por ecuaciones tipo Fokker-Planck. En particular, nuestro grupo está interesado en la resolución de las ecuaciones cinéticas que describen los plasmas totalmente ionizados. Las soluciones semianalíticas o numéricas reducen la ecuación no lineal original a un problema linealizado en el que la distribución fluctúa en torno a la solución maxwelliana de equilibrio. Toda esta gama de linealizaciones impone una serie de limitaciones en cuanto a la correcta evolución física alineal del problema. El recurso ineludible de la computación para cualquier tipo de solución, siempre aproximada, motiva la búsqueda de esquemas numéricos para los que sea posible abordar el problema no lineal directamente, contabilizando de forma íntegra toda la física implicada en cada proceso.

En todo esquema discreto lineal [1, 2] la existencia de más de una cantidad conservada puede conducir a la obtención de más de una solución numérica de equilibrio, como se muestra de forma clara en el estudio realizado por un componente de nuestro grupo [3]. Los problemas cinéticos para la Física del Plasma suponen la conservación no sólo de la densidad de partículas, sino también de la energía y el momento del sistema en ausencia de fuerzas exteriores. En estas condiciones, la solución estacionaria ha de coincidir con la correspondiente a la del equilibrio maxwelliano y ésta es única, ya que dichas ecuaciones satisfacen las condiciones del Teorema-H de Boltzmann [4]. Se pretende ahora extender el procedimiento numérico integral, fundamentado en capítulos anteriores, para la resolución de la ecuación cinética de Fokker-Planck en la Física del Plasma en condiciones de homogeneidad espacial para una distribución f isotrópica en el espacio de velocidades [5], [6], [8], [4]. El método numérico no sólo ha de dar respuesta al problema de las magnitudes conservadas; es necesario, además, constatar que el proceso de evolución temporal resulte satisfactorio, así como establecer una única solución de equilibrio, y que ésta sea la apropiada para el problema continuo que representa. Es conocido el hecho de que los procedimientos numéricos basados en incrementos finitos resultan eficientes para la descripción de estados

estacionarios en geometrías complejas y que su eficiencia se ve notablemente mermada en la representación del régimen transitorio, no mejorando los resultados obtenidos para tal fin por los esquemas en diferencias habituales. Son numerosos los estudios realizados para la optimización de esquemas numéricos en diferencias que sean coherentes con toda la física involucrada en las ecuaciones cinéticas, en particular la referencia [1] dispensa un interesante tratamiento del problema que a continuación se resuelve. Los óptimos resultados obtenidos en la resolución numérica de los procesos simples no lineales y conservativos, descritos en el capítulo precedente, han propiciado un clima de confianza en cuanto a la operatividad y eficiencia del modelo numérico que se presenta en este trabajo. Los resultados obtenidos en investigaciones previas se hallan aquí ostensiblemente mejorados gracias al concurso de una probabilidad de transición a tiempos cortos, más apropiada para el esquema de avance integral relativo al problema cinético.

Una vez más, el procedimiento de cálculo para P_T sugerido en 2.2.2 permite adecuar el propagador a la naturaleza del proceso abordado. Por otra parte, el ejercicio del ajuste iterativo para P_T mediante la función de autocorrelación numérica, confecciona un operador matricial netamente conservativo, en clara correspondencia con el operador colisional del caso continuo. El hecho de preservar como constantes las magnitudes conservadas y de obtener la distribución f , apta para la representación de los estados transitorio y estacionario, sin el recurso de linealizaciones, ofrece la posibilidad de aplicar el proceso a la construcción de una nueva teoría de transporte estrictamente no lineal en la que actualmente trabaja nuestro grupo.

4.1 La Ecuación Cinética en La Física del Plasma.

Ya se ha notado en el primer capítulo que para partículas sometidas a débil interacción, como en el caso del plasma totalmente ionizado, la ecuación cinética más apropiada en la descripción del sistema, es la Ecuación integro-diferencial de Fokker-Planck dada por (1.7). El término de campo medio es responsable de la descripción de fenómenos colectivos que contabilizan la presencia de muchas partículas. La parte colisional responde, por su parte, al efecto sobre el sistema de las colisiones binarias y puede expresarse como la divergencia de una corriente J en el espacio de velocidades, que coincide con el término Colisional de Landau. Los coeficientes de difusión y deriva dependen de la propia función de distribución de forma integral, representando los primeros momentos por unidad de tiempo en los incrementos colisionales de la velocidad, $D_{ij} = \langle \Delta v_i \Delta v_j / 2 \rangle$ y $D_i = \langle \Delta v_i \rangle$ respectivamente. Una expresión compacta para los mismos se obtiene a partir de los potenciales de Rosenbluth utilizados en las referencias [5], [6], [9] y [8]. En este capítulo se estudia la ecuación cinética de Fokker-Planck en ausencia de campo medio y con la posible presencia de una fuerza exterior F . Particularizando la ecuación (1.7) de la Introducción, la ecuación problema se reescribe en la forma

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_i \frac{\partial f}{\partial r_i} = - \left[\frac{\partial}{\partial v_i} (D_i + \frac{F_i}{m}) - \frac{\partial}{\partial v_j} D_{ij} \right] f(\mathbf{r}, \mathbf{v}; t) \quad (4.1)$$

donde se ha supuesto que F es independiente de la velocidad. Esta simplificación resulta físicamente aceptable para los casos en los que la escala temporal de los procesos colectivos

es significativamente grande comparada con los tiempos en los que predominan los efectos colisionales, responsables de las fluctuaciones en el sistema. El estudio local en un punto o región del espacio físico permite representar la función de distribución $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}; t)$ en el espacio de velocidades a través de la distribución $f(\mathbf{v}, t; \mathbf{r})$ normalizada a la densidad $\rho(\mathbf{r}, t)$.

La dependencia espacial puede introducirse mediante un sencillo esquema en diferencias de forma aditiva al operador colisional. Debe notarse que la ecuación (4.1) el tensor de difusión consta sólo de una caja 3×3 de elementos D_{ij} diferentes de cero correspondientes a los momentos $\Delta v_i \Delta v_j / 2$, siendo nulos los términos D_{ir_k} y $D_{r_k r_m}$, lo que implica que la probabilidad de transición a tiempos cortos (2.13) no es aplicable al no existir la matriz inversa para el tensor 6×6 . Sin embargo, como se muestra en el Apéndice A, cabe interpretar la probabilidad condicional P_τ representada por (2.13) como una distribución normal degenerada según

$$P_\tau = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}' - \tau \mathbf{v}') P_v(\mathbf{v}, t + \tau | \mathbf{v}', t)$$

donde $P_v(\mathbf{v}, t + \tau | \mathbf{v}', t)$ es el propagador a tiempos cortos obtenido sin la presencia del término $v_i \partial f / \partial r_i$. Esta expresión muestra la diferencia entre las escalas temporales para la evolución de f , con relación a las variables $\{r_i\}$ y $\{v_i\}$. Es obvio que en una descripción estocástica de los procesos implícitos en (4.1), mediante un conjunto de ecuaciones de Langevin generalizadas en las variables $r_i(t)$ y $v_j(t)$, éstas se relacionan en la forma $\dot{r}_i = dr_i/dt = v_i(t)$ lo que da lugar a la densidad de probabilidad $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}; t)$ representativa de un proceso estocástico de segundo orden ([7]) $\ddot{r}_i = \mathcal{F}(\mathbf{r}, \mathbf{v}; t)$, si \mathcal{F} representa una fuerza aleatoria por unidad de masa,¹ en general no uniforme. El concurso de la probabilidad de transición degenerada, para el esquema de avance plenamente integral, supone únicamente la sustitución de \mathbf{r}' por $\mathbf{r} - \tau \mathbf{v}'$, tanto en $f(\mathbf{r}', \mathbf{v}'; t)$ como en P_v si en ésta se cuenta con la fuerza exterior dependiente de \mathbf{r} . Ello se traduce en un mero desplazamiento de los índices relativos a las variables del espacio físico en cada iteración.

Una tercera posibilidad para el tratamiento de la dependencia espacial, consiste en la derivación de un nuevo propagador P_τ , distinto al habitual, mediante el procedimiento basado en la construcción de un operador auxiliar $L_{\mathbf{FP}}^*$ que conlleve a una ecuación tipo Fokker-Planck resoluble. La operatividad de esta alternativa se muestra en el Apéndice para un caso simple en las variables $\{r, v\}$; es claro que los elementos de la matriz de covarianza para la distribución global cuenta ahora con términos proporcionales a τ^3 , lo que muestra una vez más la diferencia de escalas temporales para la evolución en cada variable. En concreto, $L_{\mathbf{FP}}^*$ puede hacerse coincidir con el operador correspondiente a la descripción del movimiento browniano para la partícula libre, eligiendo convenientemente el conjunto de las factorizaciones (2.21) relativas a la actuación de $L_{\mathbf{FP}}$ sobre la función δ de Dirac. Es evidente que este proceder resultaría inviable cuando se trate el problema sin recurrir a simplificaciones geométricas.

En realidad, los procesos físicos en los que se implican las colisiones y las fuerzas exteriores, quedan descritos por el término colisional independiente de las posiciones $\{r_i\}$, y son estos fenómenos los responsables de las propiedades físicas macroscópicas del sistema. Como interesa fundamentalmente resolver el problema colisional, se supondrá en lo sucesivo que se producen las condiciones tales en las que las que la distribución puede suponerse espacialmente homogénea.

¹ en general, este término incluye la posible existencia de la fuerza determinista \mathbf{F}

En lo sucesivo se trata el caso del plasma de un sólo componente en condiciones de homogeneidad espacial. La ecuación integral de Fokker-Planck se escribe, bajo las simplificaciones aludidas, como

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial v_i} \{D_i(v, t) - \frac{\partial}{\partial v_j} D_{ij}(v, t)\} f(v, t) ; i, j = x, y, z \quad (4.2)$$

donde los elementos v_k representan las componentes del vector velocidad \mathbf{v} . Los coeficientes de deriva D_i son las componentes de un vector, que se extraen del gradiente del potencial de Rosenbluth $\varphi(\mathbf{v}, t)$. Los coeficientes de difusión son los elementos de un tensor de segundo rango obtenido del potencial de Rosenbluth $\psi(\mathbf{v}, t)$. En concreto, con

$$\varphi(\mathbf{v}, t) = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{f(\mathbf{v}', t)}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|} d\mathbf{v}' , \quad \psi(\mathbf{v}, t) = -\frac{1}{8\pi} \int \frac{f(\mathbf{v}', t)}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|} d\mathbf{v}' \quad (4.3)$$

las componentes del vector \mathbf{D} y los elementos del tensor \mathcal{D} vienen dados por las relaciones

$$D_i(\mathbf{v}, t) = -2L^{\alpha/\alpha} \frac{\partial}{\partial v_i} \varphi(\mathbf{v}, t) \text{ y } D_{ij}(\mathbf{v}, t) = -L^{\alpha/\alpha} \frac{\partial^2}{\partial v_i \partial v_j} \psi(\mathbf{v}, t) \quad (4.4)$$

según las relaciones (1.9) y (1.10). La constante $L^{\alpha/\beta}$ depende del Logaritmo de Coulomb $\lambda^{\alpha/\beta}$ para la interacción de una partícula testigo del tipo α , con un medio de partículas β , en particular: $L = L^{\alpha/\alpha} = (4\pi q_\alpha^2/m_\alpha^2)^2 \lambda$. En lo sucesivo, se eliminarán los superíndices griegos, sobreentendiendo que los parámetros alusivos al tipo de partículas interactuantes, se refieren a las colisiones binarias entre electrones.

La dependencia en la propia función de distribución para los coeficientes de convección y difusión de la ecuación cinética, confiere a ésta un carácter alineal. Se desea, no obstante, resolver (4.2) sin recurrir a ningún tipo de linealización, siguiendo el procedimiento propuesto en el capítulo anterior para procesos no markovianos.

Con el fin de simplificar el problema se ha considerado en este capítulo un plasma con distribución isotrópica en el espacio de velocidades. La simplificación introducida responde a la no existencia de direcciones privilegiadas para las partículas componentes del gas totalmente ionizado. La simetría esférica del problema permite transformar mediante un cambio de variables (1.18) la ecuación integral (4.2), en otra ecuación tipo Fokker-Planck, sobre la que se aplicará el método numérico integral. Tomando en cuenta las expresiones para la divergencia de un vector y de un tensor en coordenadas esféricas y asumiendo la independencia angular de la función de distribución $f(\mathbf{v}, t) = f(v, t)$ (4.2) se transforma en

$$\frac{\partial F}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial v} [D_v^*(v, t) - \frac{\partial}{\partial v} D_{vv}(v, t)] F(v, t) , \quad (4.5)$$

donde se ha definido la nueva función $F(v, t) = 4\pi v^2 f(v, t)$ cuya constante de normalización en v coincide con la norma atribuida a $f(\mathbf{v}, t)$ sobre todo el espacio de velocidades. La probabilidad de transición asociada a la nueva función F ha de satisfacer también la condición inicial tipo δ en la componente radial de la velocidad ya que, en las condiciones de simetría aceptadas, $\delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}') = \delta(v - v') / (4\pi v^2)$.

El nuevo coeficiente de convección para la ecuación de Fokker-Planck en $F(v, t)$ responde a la relación:

$$D_v^*(v, t) = D_v(v, t) + 2 \frac{D_{\theta\theta}(v, t)}{v}$$

donde

$$D_v(v, t) = -2L \frac{\partial \varphi}{\partial v}, \quad D_{vv}(v, t) = -L \frac{\partial^2 \psi}{\partial v^2}, \quad \text{y} \quad D_{\theta\theta}(v, t) = -\frac{L}{v} \frac{\partial \psi}{\partial v}. \quad (4.6)$$

El tensor $D_{v_i v_j}$, de acuerdo con el cambio de variables a coordenadas esféricas $(v_x, v_y, v_z) \rightarrow (v, \theta, \phi)$, sufre una transformación ortogonal, dando lugar a las componentes D_{vv} y $D_{\theta\theta} = D_{\phi\phi}$ distintas de cero. El nuevo tensor de difusión para F es diagonal como consecuencia de la simetría esférica. Tal transformación mantiene constante la traza y el determinante del tensor original en coordenadas cartesianas, como cabría esperar. La traza $\sum_{i=1}^3 D_{ii} = D_{vv} + 2D_{\theta\theta}$ coincide con el laplaciano del potencial $-\psi(v, t)$, manteniéndose, obviamente, las relaciones entre los potenciales (4.3) al igual que en cartesianas. La nueva deriva D_v^* consta de la componente D_v , del vector de convección \mathbf{D} de (4.2), en la dirección radial de la velocidad \mathbf{v} , más un término "espúreo" $2D_{\theta\theta}/v$, procedente de la simetría esférica del problema. El elemento $D_{\theta\theta}$ del tensor de difusión pasa a formar parte de la convección, introduciendo la dependencia funcional en $2/v$, que será significativa en las proximidades del origen $v = 0$.

La ecuación diferencial original se reduce a un problema unidimensional tipo Fokker-Planck en el que se avanzará la nueva función $F(v, t)$, haciendo uso del método integral directo. Los términos D_{vv} y $D_{\theta\theta}$ son positivos en todo el rango de variación de la componente radial v , mientras que el nuevo factor de convección D_v^* es positivo hasta cierto valor $v_0(t)$, a partir del cual se mantiene menor que cero, tendiendo a cero en el límite $v \rightarrow \infty$, al igual que D_{vv} . Este cambio de signo en la convección, así como la dependencia en $2/v$ en las cercanías del origen hace que la probabilidad de transición a tiempos cortos utilizada en los primeros estudios sobre este problema, resulte inadecuada para la descripción correcta del proceso cinético, cuando la velocidad de las partículas es cercana a cero. Para partículas rápidas, la probabilidad de transición (2.13) reproduce la evolución satisfactoria de $F(v, t)$ que, sin embargo, da lugar a un deficiente comportamiento de la distribución en torno a $v = 0$.

Es evidente que (2.13) no es útil para el esquema de avance integral, al no hallarse normalizada a la unidad para ningún valor finito de τ sobre el intervalo $[0, \infty]$ en la variable v . De hecho, puede comprobarse que, a pesar de renormalizar la expresión habitual de la probabilidad de transición a tiempos cortos (2.13) la solución numérica encontrada para f difiere notablemente de la distribución de equilibrio maxwelliana en las proximidades del origen. En consecuencia, será necesario derivar una nueva expresión para P_τ en la que se incluya la correcta dependencia en la variable radial v con el objeto de mejorar los resultados anteriores.

4.2 Probabilidad de transición para $F(v, t)$.

La ecuación cinética (4.2) puede ser interpretada localmente, en sentido temporal, como una ecuación que describe un proceso estocástico difusivo de Markov. Dado que la probabilidad de transición para cortos intervalos de evolución depende sólo del valor de D_i y D_{ij}

en el instante $t = t_n$, el procedimiento de avance en el tiempo desarrollado en el capítulo anterior, puede extenderse a la resolución de este problema, sin más que calcular los coeficientes difusivos antes de implementar la función para obtener su valor en $t + \tau = t_{n+1}$. Por tanto, bastará con evaluar las tasas de convección-difusión P_{ij} a partir de la función de Green $P(v, t + \tau; v', t)$ apropiada a las condiciones de frontera del problema, y suponer que, durante el corto intervalo temporal $[t, t + \tau]$ los coeficientes de difusión y deriva permanecen constantes. Obviamente esta última suposición se halla de forma explícita en cualquier esquema numérico de avance temporal, ya que la propia función de distribución aparece discretizada en el tiempo. No obstante, para la ecuación Cinética que ocupa esta sección, tanto el vector \mathbf{D} como el tensor \mathcal{D} evolucionan lentamente en el tiempo, debido al débil potencial de interacción (de largo alcance y apantallado) que gobierna los procesos de colisiones binarias, límite que valida la descripción del sistema mediante la ecuación de Fokker-Planck. Este hecho contribuye a fundamentar la aplicación del método integral.

Ya que para (4.2) se satisfacen las condiciones del Teorema-H de Boltzmann [4], cabe esperar que los coeficientes responsables de los procesos difusivos y convectivos no se distancien drásticamente de su valores en las proximidades del equilibrio maxwelliano: pueden considerarse aproximadamente invariables en el tiempo durante toda la evolución, como se verá en secciones posteriores. La ecuación en F es similar a la estudiada en el capítulo anterior para procesos no markovianos con media y varianza constantes, para los cuales la descripción numérica integral de los estados transitorio y estacionario resulta satisfactoria. A pesar de que D_v^* y D_{vv} dependen del tiempo a través de la propia distribución F , se ha mostrado que el método resulta eficaz siempre que se opte por representar el propagador a tiempos cortos de forma coherente con el problema original. El hecho de que los coeficientes difusivos varíen lentamente con el tiempo contribuye a simplificar el procedimiento de cálculo para P_τ establecido en la sección 2.2.2. Así pues, son varias las razones argumentadas que contribuyen a dirigir el tratamiento numérico del problema, según los cauces prescritos en capítulos anteriores. En último extremo, cabe señalar que cualquier proceso descrito por una ecuación diferencial interpretable como relativa a la descripción de un problema de naturaleza estocástica, es soluble a través de un propagador Π para la evolución de la condición inicial f_0 . La forma de (4.2), ajustable a una ecuación de Fokker-Planck, contribuye a facilitar el cálculo para el propagador a tiempos cortos P_τ válido para implementar la densidad de probabilidad f .

La primera dificultad técnica estriba en determinar un modelo para la probabilidad de transición a tiempos cortos $P(v, v' | \tau)$ apropiada para el problema. De nuevo se plantea la cuestión de encontrar una representación δ acorde con la condición $v \geq 0$. Para el caso de la ecuación (4.5) se establece de modo sencillo que la probabilidad de transición a tiempos cortos correspondiente a $F(v, t)$ ha de responder a la presencia necesaria de una pared reflejante en el origen. Para ello basta notar que si F se torna independiente de t en el límite $t \rightarrow \infty$, el potencial $\phi(v)$ en (1.13) de la ecuación de Fokker-Planck, presenta una singularidad en $v = 0$. Esta condición es válida para cualquier función F que represente una distribución de probabilidad. En concreto, los coeficientes de convección y difusión pueden aproximarse por los obtenidos para la solución de equilibrio $F = F_s = C v^2 \exp(-v^2/2a^2)$ donde C es la constante de normalización y a representa la velocidad térmica de la partícula. La expresión para P_τ ha de ser consecuente con la condición de reflejo en $v = 0$. La corriente

de probabilidad J

$$J = D_v^* P_\tau - \frac{\partial}{\partial v} D_{vv} P_\tau, \quad (4.7)$$

debe anularse en los límites $v \rightarrow 0$ y $v \rightarrow \infty$. De este modo la función F verifica las condiciones de corriente nula en el origen, lo que asegura la constancia de la norma inicial. Dado que, en virtud de las relaciones entre los potenciales de Rosenbluth [5], se satisface en todo instante

$$D_v^* = D_v + 2 \frac{D_{\theta\theta}}{v} = \frac{D_v}{2} + 2 \frac{D_{vv}}{v} + \frac{\partial D_{vv}}{\partial v}, \quad (4.8)$$

para la situación de equilibrio maxwelliano, si se reescribe F_s en la forma $F_s = \exp(-\phi(v))$, se tiene:

$$\phi(v) = \ln D_{vv} - \int \frac{A_v}{D_{vv}} dv = -\frac{2}{v} - \int \frac{D_v}{2D_{vv}} dv$$

Dado que en el equilibrio $D_v/2D_{vv} = -v/a^2$, $\phi(v)$ presenta una singularidad en el origen, tendiendo a $-\infty$ cuando v tiende a 0, como se afirmó. La dependencia en $2/v$ persiste durante toda la evolución al ser consecuencia de la simetría esférica. Por tanto, en todo instante t la probabilidad de transición a tiempos cortos P_τ debe conducir a las condiciones de corriente nula en los extremos de la red, mientras que la solución de equilibrio en F_s anula dicha corriente para todo valor de v . Esta última característica contribuye decisivamente al establecimiento del propagador ajustado al problema.

Conviene mantener el término $2/v$ en la forma del operador auxiliar $L_{\mathbf{FP}}^*$, ya que el cociente D_v^*/D_{vv} tiende a $2/v$ a medida que v se acerca a $v = 0$. De esta forma la dependencia funcional en $2/v$ quedará recogida en el propagador a tiempos cortos. Una primera expresión para el operador $L_{\mathbf{FP}}^*$ podría ser

$$L_{\mathbf{FP}}^* = -\frac{\partial}{\partial v} \left[\frac{2D_{\theta\theta}(v', t)}{v} + D_v(v', t) - \frac{\partial}{\partial v} D_{vv}(v', t) \right]$$

que conduciría a una probabilidad de transición a tiempos cortos dada en términos de funciones de Bessel de segunda clase I_ν de orden ν , en las que ν depende del cociente $D_{\theta\theta}/D_{vv}$ (véase el capítulo siguiente). Esta propiedad incurre en la inoperatividad del procedimiento numérico integral debido al problema que suscita el cálculo de las funciones I_ν para cada v' . Resulta sencillo mostrar, por otra parte, que la existencia de las funciones de Bessel I_ν surge de igual modo si la probabilidad de transición maxwelliana habitual (2.13) para $P(v, t + \tau | v', t)$ se integra sobre todas las variables angulares $\{\theta, \phi\}$ y $\{\theta', \phi'\}$ al efectuar el cambio a coordenadas esféricas. Esta integral puede expresarse en términos de funciones error cuyos argumentos dependen de $1/\sqrt{D_{\theta\theta}' - D_{vv}'}$ que muestra una singularidad en $v' = 0$. La resolución numérica de estas integrales aumentaría de modo excesivo el cálculo para la tasación de los elementos de la matriz de evolución.

El operador $L_{\mathbf{FP}}^*$ anterior conlleva, en cualquier caso, la derivación de un propagador P_τ inoperante si se pretende simplificar los cálculos y reducir el tiempo de computación. Es necesario recurrir a un nuevo modelo que conceda la existencia de una probabilidad de transición sencilla y apta para el problema. Con esta pretensión se ha procedido al análisis detallado de los coeficientes difusivos para reescribir el nuevo operador de forma que haga

posible eliminar la dependencia en v' sobre el parámetro ν . A la vista de (4.8) la deriva D_v^* puede expresarse como

$$D_v^* = \frac{2 D_{vv}}{v} + A_v \quad (4.9)$$

donde

$$A_v = \frac{D_v}{2} + \frac{\partial}{\partial v} D_{vv} = 2 \frac{D_{\theta\theta} - D_{vv}}{v} + D_v$$

es una función estrictamente negativa y acotada entre $A_v = 0$ y cierto valor mínimo $A_{min} < -\infty$ para cualquier valor de v y cuyo comportamiento es similar al de D_v , (véase la sección siguiente). De hecho, la razón A_v/D_v representa una función prácticamente constante en v . De esta forma, L_{FP} se interpreta como el operador procedente de una ecuación que en coordenadas cartesianas presenta un tensor de difusión diagonal con $D_{x_i x_i} = D_{vv} = D_{\theta\theta}$. La integración sobre las variables angulares en la expresión de la distribución normal tridimensional P_τ es inmediata e implica sólo funciones $I_{\frac{1}{2}}$ que se reducen a exponenciales. No obstante, esta probabilidad de transición es proporcional al cociente $v [v' + A_v(v', t)\tau]^{-1}$ cuyo denominador puede anularse para algún valor de v' al ser τ finito. Para eliminar esta posible singularidad se ha optado por reescribir A_v en la forma

$$A_v(v, t) = -v \alpha(v, t) D_{vv}(v, t) \quad (4.10)$$

donde $\alpha(v, t)$ es también una función acotada y estrictamente positiva para todo v , (figura 4.5) siempre que existan al menos los dos primeros momentos ² de la distribución $f(v, t)$, lo que se garantiza si tales momentos existen para la condición inicial f_0 pues L_{FP} preserva constantes dichos valores en toda la evolución. En definitiva, el término convectivo

$$D_v^*(v, t) = \left[\frac{2}{v} - \alpha(v, t) v \right] D_{vv}(v, t) \quad (4.11)$$

permite definir el operador auxiliar L_{FP}^* en la forma

$$L_{FP}^* \delta(v - v') = \frac{\partial}{\partial v} D_{vv}(v', t) \left[\frac{2}{v} - v\alpha(v', t) - \frac{\partial}{\partial v} \right] \delta(v - v').$$

La representación δ apropiada será la correspondiente al problema unidimensional de la ecuación diferencial auxiliar de Fokker-Planck para una probabilidad de transición $P(v, v'|\tau)$ con deriva $A = (2/v - \alpha v)D$ y difusión constante D , tratando α y D como parámetros positivos independientes de τ y de la variable v' , según el procedimiento presentado en la sección 2.2.2.

La ecuación diferencial auxiliar en P_τ obtenida equivale a la ecuación para de probabilidad de transición para el proceso de Rayleigh, resoluble por el método habitual que reduce la ecuación a un problema de autovalores (1.14) tipo Sturm-Liouville ([10], [11]). La función $\delta(v - v')$ queda representada por las autofunciones $\{\xi_n(v)\}$, $v > 0$, del problema en P_τ en lugar de utilizar su representación de Fourier. En términos de los Polinomios

²se exceptúa el momento de orden cero, coincidente con la norma de f .

generalizados de Laguerre L_n^β con $\beta = 1/2$, la función $\delta(v - v')$ se expresa mediante la serie infinita

$$\delta(v - v') = 2x^2 e^{-x^2} \sqrt{\frac{\alpha}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n!}{\Gamma(3/2 + n)} L_n^{1/2}(x^2) L_n^{1/2}(x'^2) = \sum_{n=0}^{\infty} \xi_n(v) \xi_n(v')$$

donde $x = v\sqrt{\alpha/2}$. La solución particular de la ecuación auxiliar con las condición de reflejo en $v = 0$ se expresa como

$$P_\tau = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-4n\tau} \alpha \xi_n(v) \xi_n(v')$$

que puede sumarse haciendo uso de la Fórmula de Adición de los Polinomios de Laguerre [10] para dar, finalmente, la expresión de la probabilidad de transición a tiempos cortos:

$$P_\tau = P(v, v' | \tau) = \sqrt{\frac{\alpha}{2}} \frac{v}{v'} \frac{1}{z\sqrt{\pi(1-z^2)}} \times \left\{ \exp\left[-\frac{\alpha(v-zv')^2}{2(1-z^2)}\right] - \exp\left[-\frac{\alpha(v+zv')^2}{2(1-z^2)}\right] \right\} \quad (4.12)$$

donde

$$z = \exp(-\alpha D\tau) \simeq 1 - \alpha D\tau, \quad \alpha = \alpha(v', t), \quad D = D_{vv}(v', t).$$

Puede verificarse que P_τ se halla normalizada a la unidad sobre el intervalo $[0, \infty[$ y satisface las condiciones de frontera que suponen la anulación de la corriente de probabilidad J de (4.7) en los extremos de dicho intervalo. Así mismo, de la probabilidad de transición a tiempos cortos en (4.12) se derivan los momentos correctos relativos a la ecuación diferencial de Fokker-Planck original. En particular, es sencillo comprobar las relaciones

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \int_0^\infty \frac{v-v'}{\tau} P_\tau dv = D\left(\frac{2}{v'} - \alpha v'\right) = D^*(v', t) \quad y$$

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \int_0^\infty \frac{(v-v')^2}{2\tau} P_\tau dv = D_{vv}(v', t) = D$$

así como el resto de las propiedades señaladas en la sección 2.2.1.

El propagador obtenido en esta sección muestra también la dependencia en τ según $1/\sqrt{\tau}$ $\exp[-K^2(v, v'; t)/\tau]$ referenciada en la página 31, que tiende a cero más rápidamente que cualquier potencia en τ para $\tau \ll 1$. Al presentar el operador de (4.5) la forma de un operador de Fokker-Planck, el término $\tau \cdot L_{FP}$ que dispensa la expresión de P_τ , concede una excelente aproximación del propagador verdadero $\Pi(v, t + \tau | v', t)$, mucho más precisa que la utilizada en cualquier esquema en diferencias, cuyo error de truncamiento sí depende realmente de una potencia de τ .

Como se indicó anteriormente, los parámetros $\alpha(v, t)$ y $D_{vv}(v, t)$ que concurren en P_τ son funciones acotadas y suficientemente regulares para todo valor de v , siendo prácticamente invariantes en t . Este hecho condiciona la adaptabilidad de P_τ a las características de problema para el avance temporal de la nueva función $F(v, t)$. La función de distribución

$f(v, t)$, en la componente radial de la velocidad, se deduce de $F/(4\pi v^2)$, sin que la división por v^2 presente problemas numéricos en las proximidades del origen ya que, como se ha notado, la probabilidad de transición utilizada en el esquema numérico cuenta ya con el efecto de la dependencia en $1/v$ en torno a $v = 0$. El parámetro α , en función del momento de segundo orden en F , $a^2/3 = \langle v^2 \rangle$, oscila entre $8/(5a^2)$ y $1/a^2$ para cualquier $F(v, t)$ en los límites $v \rightarrow 0$ y $v \rightarrow \infty$, lo que contribuye a que P_τ aproxime notablemente la dependencia funcional que presentaría el propagador verdadero Π si éste se conociera.

En lo que resta de exposición, se ha optado por representar el problema mediante un conjunto de magnitudes adimensionales $\{g_i^0\}$ originado al definir la variable v en función de la velocidad térmica $a = \sqrt{KT/m}$ (K es la constante de Boltzmann y T la temperatura) y absorber en el tiempo t el resto de las constantes. De esta forma, se tiene

$$\begin{aligned} t^0 &= t \frac{L^{e/a} n_0}{a^3} & v^0 &= \frac{v}{a} \\ n^0 &= \frac{n(t)}{n_0} & f^0 &= a^3 \frac{f(v, t)}{n_0} \\ D_i^0 &= \frac{a^2 D_i}{L^{e/a} n_0} & D_{ij}^0 &= \frac{a D_{ij}}{L^{e/a} n_0} \end{aligned} \quad (4.13)$$

Para no sobrecargar la notación se prescindirá en lo sucesivo del indicador 0 . En este sistema de unidades, las integrales para la densidad $n = 1$ y la energía $T = 1$ son, respectivamente

$$n(t) = \int_0^\infty 4\pi f(v, t) v^2 dv \quad y \quad T(t) = \int_0^\infty \frac{4}{3} \pi f(v, t) v^4 dv \quad (4.14)$$

que representan las magnitudes conservadas para el problema.

4.3 Cálculo de D_{ij} y D_i .

La dependencia en f de los coeficientes difusivos obliga a evaluar en cada paso temporal los potenciales de Rosenbluth dados por (4.3), de los que se desprenden las expresiones para D_v , $D_{\theta\theta}$ y D_{vv} . Sin embargo, se ha optado por calcular explícitamente los términos A_v y D_{vv} mediante integración directa de las expresiones analíticas obtenidas tras eliminar la dependencia angular en las integrales de (4.3). Asumiendo las condiciones de isotropía en el espacio de velocidades para la distribución $f(v, t)$, los dos únicos parámetros implicados en la tasación del propagador a tiempos cortos P_τ vienen dados por las magnitudes adimensionales

$$\begin{aligned} D_{vv}(v, t) &= D = \frac{1}{3v^3} \int_0^v u^4 f(u, t) du + \frac{1}{3} \int_v^\infty u f(u, t) du, \\ A_v(v, t) &= A = -\frac{1}{v^2} \int_0^v u^2 f(u, t) du - \frac{1}{v^4} \int_0^v u^4 f(u, t) du \end{aligned} \quad (4.15)$$

donde se ha hecho uso de las relaciones obvias $D_{\phi\theta} = 0$, $D_{v\phi} = D_{v\theta} = 0$, $D_\phi = D_\theta = 0$ y $D_{\phi\phi} = D_{\theta\theta} \neq 0$, para las componentes del vector de convección y el tensor de difusión. Las

integrales anteriores se resuelven en el desarrollo del cálculo numérico mediante la aplicación de la Regla Extendida del Punto Medio, esto es, se recurre al mismo procedimiento de integración numérica implicado en el proceso de implementación para F . La variación temporal del momento de segundo orden $\langle v^2 \rangle$, proporcional a la energía cinética media T del sistema, se expresa según (1.12) en la forma

$$\frac{d}{dt}\langle v^2 \rangle = 2 \int_0^\infty (3D + vA)F dv = 2 \int_0^\infty (D_{vv} + 2D_{\theta\theta} + vD_v)F dv \quad (4.16)$$

que es idénticamente nula para cualquier $F(v, t)$. El núcleo integral $3D + vA$ coincide con la expresión $\sum_{i=1}^3 D_{ii} + v_i D_i$ que representa la tasa de variación de energía para cada partícula testigo del sistema inmersa en un medio de partículas idénticas, como se muestra en la relación (6.11) de la referencia [5]. La elección del nuevo parámetro convectivo A no distorsiona el significado físico atribuido a la deriva inicial \vec{D} . De hecho, A , al igual que D_v , puede interpretarse como la componente radial de la fuerza media de fricción que actúa sobre cada partícula, debida a la interacción coulombiana de corto alcance con el resto de las partículas del sistema. Mediante desarrollos en serie de Taylor es sencillo verificar cualitativamente que A y

$$D_v = -\frac{2}{v^2} \int_0^v u^2 f(u, t) du$$

muestran un comportamiento similar en todo el rango de variación de v y t . Para ello basta notar que la razón A/D_v representa una función acotada entre los límites

$$\lim_{v \rightarrow 0} \frac{A}{D_v} = \frac{4}{5} \quad \text{y} \quad \lim_{v \rightarrow \infty} \frac{A}{D_v} = \frac{1}{2},$$

siempre que f sea una función bien comportada en el sentido de la teoría de funciones de distribución. De igual forma, el parámetro auxiliar $\alpha(v, t) = -A/(vD)$ representa una función suficientemente regular en v , cuyo comportamiento en los extremos del intervalo de definición de la variable se recoge en los límites

$$\alpha(0, t) = \lim_{v \rightarrow 0} \frac{-A}{vD} = \frac{8}{5} \frac{f(0, t)}{\int_0^\infty u f du} \quad \text{y} \quad \alpha(\infty, t) = \lim_{v \rightarrow \infty} \frac{-A}{vD} = 1,$$

siendo $\alpha(0, t \rightarrow \infty) = 8/5$ cuando f se aproxima a la solución de equilibrio $N \exp(-v^2/2)$.

La simple integración por rectángulos ilustra claramente las propiedades conservativas del operador L_{FP} discretizado, ya que todos los coeficientes en la fórmula de cuadratura coinciden con la unidad. Para la resolución numérica de las expresiones (4.15) se ha hecho uso de las funciones auxiliares $G_D(i, j)$ y $G_A(i, j)$ definidas en la forma

$$G_D = \begin{cases} v_j^2/3v_i^3 & \text{si } j < i \\ 1/3v_j & \text{si } j \geq i \end{cases} \quad \text{y} \quad G_A = \begin{cases} -1/v_i^2 - v_j^2/v_i^4 & \text{si } j < i \\ -1/v_i^2 & \text{si } j = i \\ 0 & \text{si } j > i \end{cases} \quad (4.17)$$

de tal modo que en la n -ésima iteración se obtiene sencillamente

$$A_i^n = \sum_j G_A(i, j) F_j^n \Delta v \quad \text{y} \quad D_i^n = \sum_j G_D(i, j) F_j^n \Delta v. \quad (4.18)$$

integrales anteriores se resuelven en el desarrollo del cálculo numérico mediante la aplicación de la Regla Extendida del Punto Medio, esto es, se recurre al mismo procedimiento de integración numérica implicado en el proceso de implementación para F . La variación temporal del momento de segundo orden $\langle v^2 \rangle$, proporcional a la energía cinética media T del sistema, se expresa según (1.12) en la forma

$$\frac{d}{dt} \langle v^2 \rangle = 2 \int_0^\infty (3D + vA) F dv = 2 \int_0^\infty (D_{vv} + 2D_{\theta\theta} + vD_v) F dv \quad (4.16)$$

que es idénticamente nula para cualquier $F(v, t)$. El núcleo integral $3D + vA$ coincide con la expresión $\sum_{i=1}^3 D_{ii} + v_i D_i$ que representa la tasa de variación de energía para cada partícula testigo del sistema inmersa en un medio de partículas idénticas, como se muestra en la relación (6.11) de la referencia [5]. La elección del nuevo parámetro convectivo A no distorsiona el significado físico atribuido a la deriva inicial \bar{D} . De hecho, A , al igual que D_v , puede interpretarse como la componente radial de la fuerza media de fricción que actúa sobre cada partícula, debida a la interacción coulombiana de corto alcance con el resto de las partículas del sistema. Mediante desarrollos en serie de Taylor es sencillo verificar cualitativamente que A y

$$D_v = -\frac{2}{v^2} \int_0^v u^2 f(u, t) du$$

muestran un comportamiento similar en todo el rango de variación de v y t . Para ello basta notar que la razón A/D_v representa una función acotada entre los límites

$$\lim_{v \rightarrow 0} \frac{A}{D_v} = \frac{4}{5} \quad \text{y} \quad \lim_{v \rightarrow \infty} \frac{A}{D_v} = \frac{1}{2},$$

siempre que f sea una función bien comportada en el sentido de la teoría de funciones de distribución. De igual forma, el parámetro auxiliar $\alpha(v, t) = -A/(vD)$ representa una función suficientemente regular en v , cuyo comportamiento en los extremos del intervalo de definición de la variable se recoge en los límites

$$\alpha(0, t) = \lim_{v \rightarrow 0} \frac{-A}{vD} = \frac{8}{5} \frac{f(0, t)}{\int_0^\infty u f du} \quad \text{y} \quad \alpha(\infty, t) = \lim_{v \rightarrow \infty} \frac{-A}{vD} = 1,$$

siendo $\alpha(0, t \rightarrow \infty) = 8/5$ cuando f se aproxima a la solución de equilibrio $N \exp(-v^2/2)$.

La simple integración por rectángulos ilustra claramente las propiedades conservativas del operador L_{FP} discretizado, ya que todos los coeficientes en la fórmula de cuadratura coinciden con la unidad. Para la resolución numérica de las expresiones (4.15) se ha hecho uso de las funciones auxiliares $G_D(i, j)$ y $G_A(i, j)$ definidas en la forma

$$G_D = \begin{cases} v_j^2/3v_i^3 & \text{si } j < i \\ 1/3v_j & \text{si } j \geq i \end{cases} \quad \text{y} \quad G_A = \begin{cases} -1/v_i^2 - v_j^2/v_i^4 & \text{si } j < i \\ -1/v_i^2 & \text{si } j = i \\ 0 & \text{si } j > i \end{cases} \quad (4.17)$$

de tal modo que en la n -ésima iteración se obtiene sencillamente

$$A_i^n = \sum_j G_A(i, j) F_j^n \Delta v \quad \text{y} \quad D_i^n = \sum_j G_D(i, j) F_j^n \Delta v. \quad (4.18)$$

Numéricamente, sobre la red discreta intermedia habitual, la relación (4.16) se traduce en la doble suma

$$\sum_{ij} G(i, j) F_i^n F_j^n \Delta v^2$$

que es idénticamente nula, pues $G = 3G_D + v_i G_A$ se reduce a la función $G(i, j) = -1/v_i$ si $j < i$ y $G(i, j) = 1/v_j$ si $j > i$ con $G(i, i) = 0$. Evidentemente este modelo de integración no es único. En cualquier caso ha de tenerse presente que en el procedimiento de cálculo para las integrales involucradas en A y D es esencial que (4.16) se traduzca en una doble suma que confluya a cero, con la finalidad de no afectar mediante el esquema discreto a las propiedades conservativas del operador implicado en el problema continuo.

Debe notarse que para ciertas funciones $f_0(v)$, que representen la distribución inicial de partículas en el sistema, A puede ser nulo en las proximidades del origen $v = 0$ si f_0 representa un haz de partículas con velocidades comprendidas entre cierto valor v_0 y $v_0 + \delta v$. En este caso, la probabilidad de transición P_τ debe sustituirse por la obtenida cuando en (4.12) se procede al límite $\alpha \rightarrow 0$, esto es

$$P_\tau \rightarrow \frac{v}{v'} \frac{1}{\sqrt{4\pi\tau D'}} \left\{ \exp \left[-\frac{(v-v')^2}{4D'\tau} \right] - \exp \left[-\frac{(v+v')^2}{4D'\tau} \right] \right\} \quad (4.19)$$

dependiente sólo de $D' = D(v', t)$. Tanto en (4.12) como en (4.19) la componente D del tensor de difusión se supone distinta de cero. Es obvio que si D tiende a cero, P_τ se aproxima por la función $\delta(v - v')$ lo que debe traducirse en el problema discreto en la función $\delta_{ij}/\Delta v$.

4.4 Esquema numérico.

Básicamente el esquema de integración numérica utilizado ha sido ya expuesto en los capítulos precedentes, en los que se han estudiado problemas simples para ecuaciones diferenciales de Fokker-Planck con coeficientes dependientes del tiempo. Los óptimos resultados obtenidos para procesos de marcado carácter no markoviano en los que la difusión y la deriva dependen de la propia distribución (persistencia de efectos de memoria en la representación estocástica) sustentan la tesis de la aplicabilidad del método al problema que se trata en esta sección. Las mismas razones aducidas en el segundo capítulo para justificar la existencia de una probabilidad de transición P_τ en este tipo de problemas, pueden esgrimirse ahora con el fin de sancionar la aplicación de un esquema de avance temporal, apoyado en los argumentos teóricos que lo justifican para procesos estocásticos de Markov. Resulta evidente que la ecuación integral de evolución (2.9) no sólo es válida para ecuaciones lineales de Fokker-Planck. El conocimiento de un propagador adecuado para tiempos cortos de evolución da lugar a la determinación de la densidad de probabilidad en un instante $t + \tau$ si se conoce ésta en t . El proceder mediante este esquema de avance se basa en la posibilidad de evaluar en cada paso temporal los términos convectivo A y difusivo D con cada valor de la función de distribución ocurrido en el paso anterior. La eficiencia del esquema explícito integral es comparable a la de los esquemas implícitos en diferencias en los que se concursan procedimientos de predicción-corrección. Dado que P_τ cuenta sólo implícitamente con los

4.4. Esquema numérico.

valores de A y D en el instante t y éstos pueden ser evaluados correctamente a obtener $F(t + \tau)$, resulta en cierto modo irrelevante el que no se contemple una expresión analítica que explicita la correcta dependencia en el tiempo de estos coeficientes.

Numéricamente puede afirmarse que A y D son funciones "conocidas" del tiempo, independientemente de que su variación sea consecuencia de la evolución sufrida por la función f . En cierto modo, el procedimiento integral supone la aproximación markoviana en sentido localmente temporal, es decir, los coeficientes difusivos se asumen constantes durante el tiempo durante el intervalo $[t, t + \tau]$. Globalmente, la evolución de F está gobernada por la dependencia funcional de A y D en el tiempo total de evolución t . Siempre que los coeficientes no varíen drásticamente con el tiempo la superposición integral de las sucesivas funciones $F(v, t + \tau)$ confluye a la solución verdadera con un error de orden $1/N$ donde N representa el número de iteraciones.

Por otra parte, la flexibilidad en la elección del propagador P_τ concede al esquema numérico integral la posibilidad de optimizar la convergencia hacia la solución estacionaria mediante la modificación iterativa del operador de evolución, bien de forma analítica a priori, o bien mediante el concurso de la función de autocorrelación numérica. Ambos procedimientos ensalzan el criterio de no unicidad para P_τ que puede adaptarse a las condiciones particulares del problema en estudio. En particular, la existencia de algunas cantidades conservadas — norma unidad y segundo momento de F — impone la existencia de nuevas condiciones satisfechas por P_τ que, cumpliendo las propiedades de 2.2.2, conducen a la evolución de F en sentido físicamente coherente. Con esta finalidad se han presentado algunas opciones en el capítulo anterior para adaptar la probabilidad de transición a tiempos τ a cada problema particular, sin que ello suponga desvirtuar el sentido físico del propagador original. Realmente estos procedimientos derivan en una expresión de P_τ variable con el tiempo, hecho que ya se contabiliza en la dependencia temporal de A y D .

La red discreta elegida para la resolución de los problemas previos es válida también para la ecuación cinética del plasma que aquí se trata. Las razones para tal elección fueron referidas en el capítulo anterior y refrendadas en la sección precedente, en la que se presentó un método de cálculo para los coeficientes difusivos que conlleva la anulación de la dependencia de la expresión que sintetiza las propiedades conservativas del operador \mathbf{L}_{FP} . A pesar de que aquí se trata de implementar la función $F(v, t)$, que no es una función de distribución de un sistema físico real, la interpretación física del esquema de evolución es la misma que para f . Si el argumento de la integral para la densidad de partículas en (4.14) se expresa como $F(v, t)dv$ se comprende fácilmente que en el caso discreto puede entenderse de nuevo como la cantidad (o proporción) de partículas del sistema cuyas velocidades tienen un módulo v comprendido entre $v_i - \Delta v/2$ y $v_i + \Delta v/2$. De otra forma, f se interpreta como la función de distribución representativa de una sucesión de partículas monocromáticas con velocidades v_i . Análogamente $F_i v_i^2 \Delta v$ ofrece el número de partículas de la colectividad con energía comprendida entre $T_i - \Delta T$ y $T_i + \Delta T$, donde $T_i = v_i^2$, proporcional a la energía por unidad de masa.

El esquema numérico habitual requiere evaluar en cada iteración la suma

$$F_i^{n+1} = \sum_j P_{ij}^n F_j^n \Delta v = \sum_j Q_{ij}^n F_j^n$$

extendida, en principio, sobre los N puntos de la red. A diferencia de los esquemas

difusión y deriva independientes del tiempo los elementos de la matriz de avance temporal varían en cada iteración, por lo que han de contabilizarse todos los elementos Q_{ij}^n con los coeficientes $A(v_j, t)$ y $D(v_j, t)$ de (4.15) y (4.12) o (4.19). La expresión dada para la probabilidad de transición a tiempos cortos, incluye en sí misma, a través de la representación δ utilizada, la condición de frontera apropiada para el origen. El efecto de la dispersión se contabiliza simultáneamente en las funciones D y $\alpha(v, t)$. El parámetro α no representa en sí mismo la convección, ya que ésta está dirigida por D_v . El efecto de deriva -al igual que el difusivo- ha de enterarse contabilizado por la expresión completa de la función P_τ , máxime cuando la integración (4.20) se extiende sobre todos los intervalos. Tras cada paso temporal n se recalculan los valores de A y D , que llevados a (4.12), permiten determinar las tasas de convección y difusión simultáneas Q_{ij}^n , con $v = v_i$, $v' = v_j$ y $t = n\tau$. La matriz de evolución Q permite implementar la función F . Conviene, como se expuso en aplicaciones anteriores, renormalizar los elementos de la matriz de avance temporal en cada paso. La norma $C(j)$ de la probabilidad P_τ en la n -ésima iteración temporal

$$C(j) = \sum_{i=1}^N Q_{ij}^n$$

difiere ligeramente de la unidad para aquéllos intervalos próximos al extremo superior de la red ($j = N - 2, N - 1, N$) ya que el error cometido al limitar la semirecta real infinita del problema continuo, al valor $v^{max} = v_N$ es tanto mayor cuanto más se aproxime j al índice máximo N .

El error de truncamiento $\epsilon(j)$ cometido en la evaluación de los $C(j)$ puede acotarse atendiendo a la expresión (4.12). Para cada intervalo j , como primera aproximación, el error estimado es

$$\begin{aligned} \epsilon(j) &\simeq \frac{\tau_j}{\sqrt{\pi} v_j} [e^{-(v_j - v_N)^2} - e^{-(v_j + v_N)^2}] - \\ &- \frac{1}{2} \left[\text{fer}\left(\frac{2(v_j + v_N)}{\sqrt{\tau_j}}\right) - \text{fer}\left(\frac{2(v_j - v_N)}{\sqrt{\tau_j}}\right) \right] + 1 \\ &\text{donde } \tau_j = D(v_j, n\tau)\alpha(v_j, n\tau)\tau = D_j^n \alpha_j^n \Delta t. \end{aligned}$$

En particular, para el primer punto de la red, despreciando el valor de $\Delta v/2$, se tiene

$$\epsilon(1) \leq 1 - \text{fer}\left(2N \frac{\Delta v}{\sqrt{\Delta t}}\right)$$

que decae a cero rápidamente, a medida que se aumenta el número N de puntos, o se disminuye el paso temporal. Para cualquier red habitual en este tipo de problemas $\epsilon(1)$ es numéricamente nulo. Para el último intervalo de la retícula, el error estimado es

$$\epsilon(N) \leq \frac{\sqrt{\tau_N}}{\pi v_N} (1 - e^{-4v_N^2}) - \frac{1}{2} \text{fer}\left(N \frac{\Delta v}{\sqrt{\tau_N}}\right) + 1$$

cuyo límite superior es $\frac{1}{2}$: el error cometido en la tasación de las normas $C(j)$ aumenta a medida que se aumenta el índice j . El error máximo cometido podrá ser de hasta el 50

por ciento, para el último de los intervalos. La errónea normalización de la función P_τ sobre los extremos de la red, supone la deficiente medida de las tasas convectivo-difusivas, se computan la cantidad de partículas con velocidades altas que pasan a tener velocidad menor un tiempo τ posterior. Este hecho puede suponer, para gran número de iteraciones, la propagación inevitable de errores que destruyan las propiedades conservativas del sistema. En particular, para un paso temporal del orden de 10^{-2} $C(N)$ es del orden del 80 por ciento de la unidad. Esta desviación decrece notablemente para $j = N - 1$ y $j = N - 2$, en particular, para éste último $C(N - 2)$ es ya 0.998, si $\Delta v \simeq \tau$. Conviene, como se apuntó en aplicaciones previas, renormalizar las tasas Q_{ij}^n antes de proceder la $(n+1)$ -ésima iteración. Los nuevos elementos $Q_{ij}^n/C(j)$ de la matriz de avance temporal asegurarán así la conservación de la norma unidad para la función de distribución del problema. Sin embargo, $D(v_j, n\tau)\tau$ es próximo a cero en las cercanías de v_N , lo que origina que P_τ pueda aproximarse analíticamente por la función $\delta(v - v')$ y por ello Q_{ij}^n se interpreta como la función δ_{ij} de Kronecker a partir de cierto valor del índice j , a partir del cual τ es menor que $\Delta v^2/(4\pi D_j)$, cantidad que marca el límite de la aplicabilidad de la integración por rectángulos. Los efectos de dispersión y deriva quedan así eliminados aun cuando A y D no sean nulos. Por el reducido número de partículas con velocidades altas esta alteración resulta prácticamente inapreciable siempre que $C(j)$ coincida con la unidad en los puntos más interiores. La renormalización de las tasas Q_{ij}^n supone pues recurrir a la sustitución de las mismas por δ_{ij} , en cierto entorno a la izquierda de $v_N = v^{max}$. Es interesante notar que para valores τ excesivamente pequeños los errores numéricos producidos en la evaluación de las exponenciales de (4.12) resultan significativos; en estos casos, a pesar de conservarse la norma de F , las tasas convectivo-difusivas de la matriz de avance se desvían de las "reales". Físicamente estas tasas pueden no ser correctas y conducir al sistema a una evolución no satisfactoria, como muestra el contraejemplo dado en el capítulo segundo para un proceso de Wiener en $[-1, 1]$.

Operar en doble precisión resultará conveniente en aquéllos problemas en los que se desee observar la evolución durante un intervalo temporal reducido. También se puede recurrir a un modelo de integración en el que cada Q_{ij}^n se exprese en términos de funciones error a modo de (2.34) calculando analíticamente la integral de P_τ sobre v' entre $v_j - \Delta v/2$ y $v_j + \Delta v/2$ con A y D constantes. En cualquier caso, la norma inicial de F no varía en cada iteración, mientras que la norma euclídea convencional del vector $\{F_i^n\}$ definida como $\sum_i (F_i^n)^2$ decrece hasta estabilizarse a medida que F tiende a la solución de equilibrio, ya que cada elemento Q_{ij}^n se conserva siempre menor o igual que la unidad. La correcta normalización de las tasas convectivo-difusivas de la matriz Q favorece no sólo el que se preserve la norma unidad de la distribución sino que conduce a la estabilidad del esquema numérico integral para cualesquiera Δv y τ .

Con relación a lo expuesto en el párrafo anterior, conviene de nuevo subrayar que los coeficientes que definen los procesos difusivos en la ecuación Cinética de Fokker-Planck, varían lentamente con el tiempo. Para la condición inicial (3.12) tipo histograma elegida para F , puede apreciarse cómo la variación de A y D es sólo significativa en las primeras iteraciones. Esta característica permite reducir el tiempo de computación requerido al no ser estrictamente necesario recalcular los coeficientes difusivos en cada paso temporal una vez que éstos se aproximan, hasta cierto orden, a sus correspondientes expresiones en el estado de equilibrio.

Por otra parte, el tiempo de cálculo puede reducirse aún más si se tiene en cuenta que gran parte de los elementos de la matriz de evolución son nulos. En concreto, es suficiente evaluar los términos Q_{ij}^n para los cuales la diferencia $|v_i - v_j|$ sea del orden de $7\Delta v$ ó $9\Delta v$, fijando el valor del paso temporal en el desarrollo del programa de forma que la razón $\tau = |v_i - v_j| / \sqrt{4D_j\tau}$ sea del orden de 5 unidades para cualquier par (i, j) . De este modo, se asegura que la probabilidad de que v_i caiga en un entorno de v_j -de radio $\approx 4\Delta v$ - sea próxima a la unidad. También puede optarse por fijar el valor de τ y calibrar, mediante un sencillo algoritmo numérico, el radio del intervalo máximo con centro en v_j sobre el cual cada Q_{ij}^n es diferente de cero. Se observa que tomando τ del orden de un décimo del tiempo de relajación estimado, es suficiente evaluar en cada iteración los términos $\{Q_{i,i-4}, Q_{i,i-3} \cdots Q_{i,i+4}\}$ para cada índice i . Este cálculo en cada paso temporal puede eliminarse construyendo una tabla de los valores de $P_\tau(v_i, v_j^*)$ con $v_j^* = v_j \pm A_j\tau$ para $D = 1$, usando una sencilla transformación de escala en la variable v , de tal forma que los P_{ij} puedan calcularse a través de una simple interpolación lineal sobre los valores reales de la variable transformada v .

La probabilidad de transición (4.12) se adapta de forma óptima al problema, ya que esta expresión se ha deducido de la representación δ de Dirac que recoge en sí misma la dependencia funcional en $2/v$ propia de la simetría esférica. El decaimiento de la función D a cero, a medida que aumenta el valor de v , hace que P_τ se asemeje a la función $\delta(v - v')$ para altos valores de v' generando una lenta evolución de las colas de la distribución f , véanse las *figuras* 4.6 y 4.5. Aun para un valor del paso temporal relativamente grande comparado con el tiempo de relajación, la evolución de F es ampliamente satisfactoria, lo que prueba que el modelo de P_τ aproxima al propagador verdadero con precisión aparentemente mayor que el orden $O(\tau^2)$ establecido en el cálculo. Este comportamiento se debe a las características de los coeficientes difusivos A y D , que físicamente reproducen la situación de la débil interacción entre las partículas del sistema. Esta característica de la interacción coulombiana para colisiones binarias dirige la evolución del sistema de forma que la transferencia de momento lineal es siempre reducida, lo que matemáticamente se traduce en un comportamiento suficientemente regular de las funciones A y D . Según la sección (2.2.2), cuando P_τ incluyen los coeficientes de difusión y deriva tasados sobre las variables $\{v'\}$, se está asumiendo implícitamente que para τ reducido las derivadas de éstos son irrelevantes -al ser P_τ próxima a $\delta(v - v')$ - y la probabilidad de transición se aproxima por la distribución Gaussiana. En el problema de la ecuación integral de Fokker-Planck el comportamiento suficientemente regular de $\alpha(v, t)$ y $D(v, t)$ en todo el rango de variación de v , contribuye a que esta característica se mantenga incluso para valores del tiempo de evolución τ mayores que los aceptables para otros procedimientos de integración numérica. Esta variación sólo resulta significativa en el límite $v \rightarrow 0$, debido a la presencia del término $2/v$ sobre la convección efectiva $2D_{\theta\theta}/v + D_v$ para F , pero esta dependencia se encuentra recogida ya en la representación δ . En consecuencia, a pesar de que P_τ es válida hasta orden $O(\tau^2)$ la aproximación funcional introducida al sustituir el propagador verdadero por la probabilidad de transición (4.12) resulta excelente sobre el intervalo $[0, v_m]$ en el que se aborda el problema y sobre el cual resultan significativas las transferencias de momento, siempre que τ no exceda el tiempo de evolución estimado hasta la solución de equilibrio.

Las *figuras* 4.1 y 4.2 muestran la evolución de los coeficientes de difusión y deriva, cuando se recalculan los mismos en cada paso temporal. En consonancia con las afirmaciones anteriores, puede apreciarse que tal evolución resulta más significativa en los primeras

4.4.1. Magnitudes conservadas.

iteraciones temporales (figura 4.1). El cambio experimentado por el parámetro $\alpha(v, t)$ durante el avance es también mínimo.

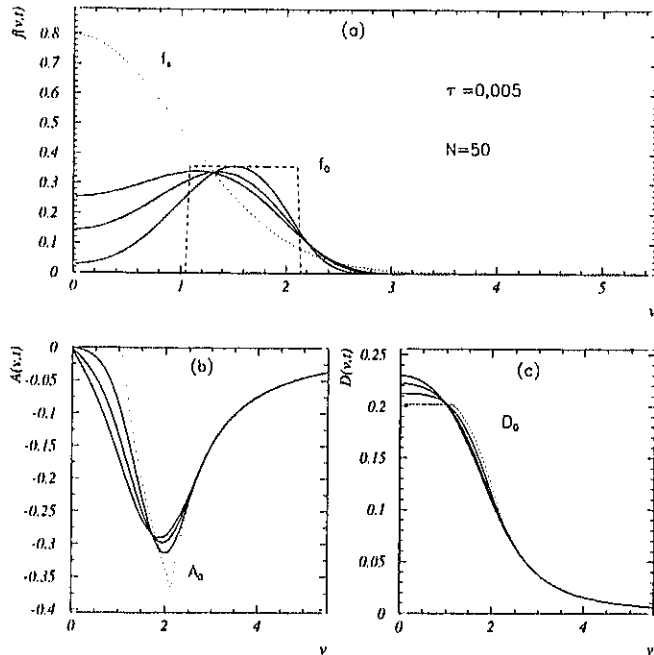


Figura 4.1: Evolución de f , A y D en las primeras iteraciones.

evolución de f y de los coeficientes difusivos en 50 iteraciones con $\Delta v = 2 \times 6/151$ y τ indicado en (a). f_0 es la condición inicial tipo histograma, de energía igual a la gaussiana estacionaria teórica (punteada). En (b) y (c) puede apreciarse como los coeficientes A y D exhiben una lenta evolución con el tiempo, aun para las primeras iteraciones.

4.4.1 Tratamiento de las magnitudes conservadas.

La ecuación de Fokker-Planck en la Teoría Cinética del Plasma se describe en función del término colisional de Landau, que permite conservar la energía cinética y el momento lineal del sistema, así como la positividad y la norma de la función de distribución. Para el tratamiento numérico integral del problema se pretende ahora mostrar la efectividad del modelo para abordar no sólo el estudio del problema de evolución, sino también para responder a la correcta descripción del estado de equilibrio maxwelliano y a las propiedades conservativas del sistema físico. El mantenimiento de la norma para cualquier condición inicial f_0 es trivial, a la vista de (4.20), ya que $\sum_i Q_{ij}^n = 1$ en toda iteración. El carácter positivo de todos y cada uno de los elementos del vector $\{f_i^n\}$ se mantiene a lo largo

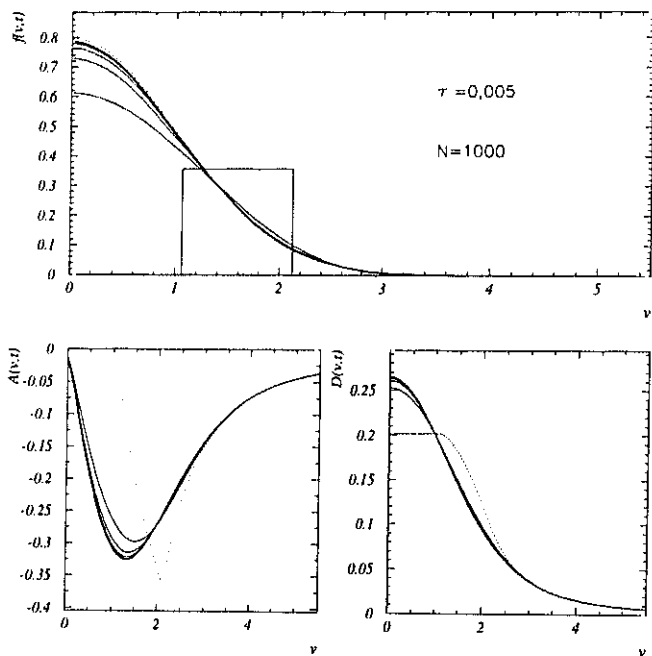


Figura 4.2: Evolución de f , A y D (continuación).

Gráficas complementarias a la figura anterior para 1000 iteraciones. Se representan 5 etapas equiespaciadas en el tiempo. A partir de $t = 200 \tau$ tanto A como D pueden suponerse constantes. Sin embargo, el problema se ha resuelto recalculando los coeficientes en cada paso temporal.

proceso evolutivo completo, ya $Q_{ij}^n \geq 0$ al tener P_τ sentido de una probabilidad condicional y representar una función de distribución en su sentido más amplio. El momento lineal total del sistema también permanece constante en el tiempo pues, al ser nula la corriente de probabilidad, o flujo de partículas, $\mathbf{J} = \{D_i f - \partial/\partial v_j D_{ij} f\}$ en los límites de la superficie infinita que limita el espacio de velocidades, la derivada temporal del momento medio adimensional del sistema

$$\frac{d\langle \mathbf{v} \rangle}{dt} = \int \bar{D}(\mathbf{v}, t) f(\mathbf{v}, t) d\mathbf{v} = -\frac{1}{2\pi} \int \int \frac{\mathbf{v} - \mathbf{v}'}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|^3} f(\mathbf{v}, t) f(\mathbf{v}', t) d\mathbf{v} d\mathbf{v}'$$

es idénticamente nula. Sin embargo, la componente radial media del momento $\langle v \rangle = \int v F dv$ variará con el tiempo hasta alcanzar el valor estacionario $\langle v \rangle = \int N v^3 \exp(-v^2/2) dv$ cuando f tiende a la solución de equilibrio $N \exp(-v^2/2)$.

La única magnitud adicional que ha de mantenerse constante durante la evolución es la energía cinética media del sistema, proporcional a la temperatura adimensional T . Dado que los términos de difusión y convección para la ecuación cinética representan las variaciones

temporales de los incrementos colisionales en la velocidad $\langle \Delta v_i \Delta v_j \rangle$ y $\langle \Delta v_i \rangle$ respectivamente, es fácil derivar en función de ellos la tasa de energía perdida por cada partícula y por unidad de tiempo, así como la misma para todo el sistema, de forma análoga a la expresión anterior para $d\langle v \rangle/dt$. En este sentido Trubnikov obtiene [5] --suma sobre índices repetidos--

$$\frac{d}{dt} v_i v_i = \frac{dv^2}{dt} = 2 (D_{ii}(v, t) + v_k D_k(v, t))$$

para el intercambio de energía de cada partícula por unidad de tiempo. Multiplicando ambos miembros por $f(v, t)dv$ e integrando sobre todo el espacio de velocidades

$$\frac{1}{3} \frac{dT(t)}{dt} = -\frac{1}{4\pi} \int \int \frac{v'^2 - v^2}{|v - v'|^3} f(v, t) f(v', t) dv dv' = 0, \quad (4.21)$$

expresión equivalente a (4.16) y a (1.12). La dependencia funcional especial de los elementos del tensor de difusión y de las componentes del vector de deriva en la propia distribución $f(v, t)$ origina la conservación del momento y la energía totales.

Como primer acercamiento al problema de las magnitudes conservadas en el esquema numérico integral, conviene evaluar analíticamente el orden de desviación introducido, al tratar la evolución de la función de distribución, mediante argumentos probabilísticos. Si $T(t + \tau)$ representa la energía total del sistema en el instante $t + \tau$, contando con la ecuación de evolución (2.9) se tiene

$$T(t + \tau) = \int v^2 F(v, t + \tau) dv = \int \int P(v, t + \tau | v', t) v^2 F(v', t) dv dv', \quad (4.22)$$

Intercambiando el orden de integración, la integral de $v^2 P_\tau$ puede resolverse directamente para cada modelo de probabilidad de transición elegido. No obstante el procedimiento más general, a la vista de las propiedades exigidas a P_τ recogidas en la sección 2.2.1, consiste en expresar $\langle v^2 \rangle$ como función de los momentos de dicha probabilidad. En definitiva, y hasta orden $O(\tau^2)$ se tiene

$$\int v^2 P_\tau dv = 2\tau \{ D_{\theta\theta}(v', t) 2D_{vv}(v', t) + v' D_v(v', t) \} + v'^2 + O_v(\tau^2) \quad (4.23)$$

lo que da finalmente

$$T(t + \tau) - T(t) = 2\tau \int v^2 F(v, t) \{ 3D + vA \} dv + O(\tau^2). \quad (4.24)$$

Si se procede al límite $\tau \rightarrow 0$ de $(T(t + \tau) - T(t))/\tau$ se comprueba que (4.24) coincide con la integral de (4.21). Por esta razón es esencial que la probabilidad de transición a tiempos cortos esté perfectamente definida y satisfaga las mismas propiedades que el propagador Π verdadero en $\tau \approx 0$. Resulta evidente que $T(t + \tau)$ coincidirá con $T(t)$ en el caso trivial de $\tau = 0$, sin embargo la integral sobre v de (4.24) ha de ser numéricamente próxima a cero. Este hecho, unido al pequeño valor de τ hará que la energía total prácticamente no varíe. Los errores introducidos por la discretización del problema conducen a la posible pérdida sustancial de energía a lo largo de todo el proceso evolutivo. Con el fin de subsanar estas

alteraciones puede recurrirse a cualquiera de las correcciones establecidas en el capítulo segundo para esquemas numéricos en los que se conoce la ley de evolución para alguno de los momentos de la distribución. La primera de las alternativas reseñadas sugiere la posibilidad de establecer una corrección de orden τ^2 en la desviación típica de P_τ . Esta alternativa se traduce en la sustracción del término $O(\tau^2)$ en (4.24) a la cantidad $3D$, por lo que D ha de ser sustituido por $D - O(\tau^2)/(6\tau)$ donde $O(\tau^2)$ puede evaluarse numéricamente. Sin embargo, esta opción ocasiona problemas cuando el factor correctivo $O(\tau^2)$ -independiente de v - se sustrae a D sobre puntos v_j en los que D_j tiende a cero, dando lugar a desviaciones medias negativas para P_τ . En este caso, conviene efectuar la sustitución de $D(v, t)$ por $D^* = D(v, t) - \tau A(v, t)^2/6$ siempre que D^* se mantenga positivo para cualesquiera v y τ en cada iteración. Esta última corrección conduce numéricamente a una variación de T inapreciable (figura 4.3) para un elevado número de iteraciones. En particular, para $\tau = 0.1$, $\Delta v = 0.05$ y $N = 100$ la desviación de T respecto del valor inicial $T_0 = 1$ es del orden del 1% al cabo de 10^5 iteraciones.

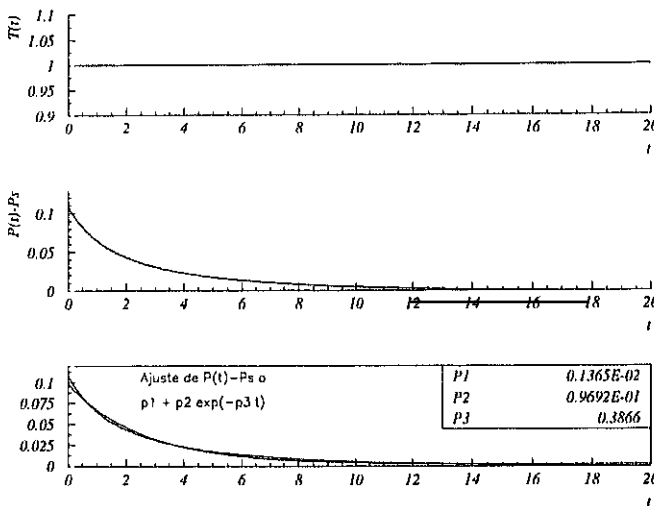


Figura 4.3: Energía $T(t)$. Momento $P_s = \langle v \rangle(t)$.

Evolución de los momentos $T(t_n)$ y $P(t_n)$ en 4000 iteraciones. P se ha representado reducido en su valor $P_s = \int v F_s dv$ para la solución estacionaria de equilibrio, la gráfica se refiere pues a $P_n - P_s$; el decaimiento casi exponencial de esta diferencia permite estimar un tiempo de relajación del sistema del orden de $1/0,38$ unidades.

La segunda de las alternativas ofrecidas en el segundo capítulo para adecuar P_τ a las características del problema, en cuanto a la conservación de magnitudes conservadas, plantea la posibilidad de recurrir al ajuste iterativo dispensado por la función de Autocorrelación Numérica Ψ . Esta opción se presenta más aconsejable que la corrección analítica del propagador a tiempos cortos, en tanto que Ψ favorece la adaptación de la matriz de

evolución \mathcal{Q} , a las propiedades de conservación del problema contabilizando ya los efectos de las discretizaciones.

Se ha mostrado en el capítulo anterior que el concurso de Ψ supone, en último extremo, la generación de un propagador P_τ variable en el tiempo t_n , mediante una corrección de segundo orden en τ que no desvirtúa el sentido físico de la probabilidad de transición ni las propiedades esenciales de la misma, relacionadas con el problema real que aproxima. La presencia de un término de orden τ^2 aparece ya en la expresión habitual (2.13) por lo que la participación de Ψ en P_τ se halla, en cierto modo, legitimada (ver capítulo 3). La no unicidad de la función P_τ para cada problema, corrobora el intento de adecuación del propagador a la ecuación integral de Fokker-Planck a través de Ψ . En particular, la función de autocorrelación es suficiente que actúe, como se mostró, sobre el coeficiente A responsable de los efectos de deriva en la ecuación original. Ello supone que la función auxiliar $\alpha(v', t)$, responsable de los efectos de dispersión de cada haz monocromático de partículas con velocidades v' a lo largo de toda la red, debe reemplazarse por $\Psi\alpha$ en cada iteración, siendo

$$\Psi_n = \Psi_{n-1} + (T_n - T_0) C_0$$

con $\Psi_0 = 1$ y C_0 constante. De este modo, Ψ oscila en torno a la unidad, estabilizándose en un valor próximo a Ψ_0 mientras que T_n tiende al valor constante T_0 .

La aplicación simultánea de las dos correcciones anteriores concede un tratamiento del problema en el que T_n permanece prácticamente constante para cualquier número de iteraciones, siendo al oscilación de Ψ inapreciable. Realmente, los errores introducidos por la discretización ocasionan siempre pérdidas en la energía del sistema si se recurre sólo a la primera de las correcciones. Es esencial, por tanto, utilizar la función Ψ que resulta siempre convergente cuando A y D se calculan correctamente, es decir, si el problema discreto conduce a (4.16) expresada en función de $G(i, j)$ dada en la sección precedente.

Según algunos de los trabajos citados — [14] y [13] — en este capítulo, la conservación de la energía parece conducir a la evolución correcta de la entropía $S(t)$ del sistema, que crece hasta el máximo alcanzado en el estado de equilibrio maxwelliano. La *figura* 4.4 muestra como $S(t) = - \int f \ln f d^3v$ aumenta en cada iteración saturándose cuando se alcanza el valor estacionario de la entropía máxima. En el caso mostrado, τ es relativamente grande, lo que no afecta a la creación de entropía del sistema. Prácticamente no existe limitación para el valor del paso temporal τ para que S varíe de forma físicamente aceptable en cada iteración. En cambio, los esquemas en diferencias exigen un paso temporal excesivamente reducido si pretenden lograr que S aumente den cada etapa hasta su valor máximo en el equilibrio [13].

Con la forma definitiva de P_τ cualquier condición inicial de f_0 físicamente aceptable, el esquema evoluciona inequívocamente hasta la solución de equilibrio esperada $N \exp(v^2/2)$ (*figuras* 4.1 y 4.2) no presentando problemas de inestabilidad ni de existencia de más de una solución estacionaria. Es interesante notar que si A y D se calculan sólo durante un número limitado de iteraciones, hasta que ambas se aproximan a las observadas en las proximidades del equilibrio, la solución numérica integral se estabiliza aun sin el concurso de ajustes. La situación es similar a la exhibida para el comportamiento oscilante de Ψ_n en la *figura* 3.8.

4.5 Comparación con la solución en diferencias.

En los esquemas en diferencias a tres puntos resulta imposible mantener constante más de una cantidad a lo largo de toda la evolución. Por otra parte, se ha mostrado en trabajos previos que la presencia de más de una cantidad conservada en deriva a hacia la existencia de varias soluciones de equilibrio para el tratamiento de problemas lineales en diferencias. Este inconveniente, en cambio, no se presenta en los esquemas integrales que se han venido proponiendo a lo largo de la exposición. Este tipo de esquemas resulta especialmente indicado para abordar problemas físicos con magnitudes constantes en el tiempo, ya que la optimización de la probabilidad de transición a tiempos cortos puede ejercitarse mediante el concurso de la función de autocorrelación numérica de forma iterativa. Resulta fundamental que la solución numérica de la ecuación cinética, presentada en términos del operador colisional de Landau, preserve la norma unidad de la distribución y el segundo momento de ésta. El significado físico de la función f en el régimen transitorio no queda así desvirtuado por los efectos de la discretización. Así mismo, la descripción del régimen estacionario resulta apropiada si tales cantidades se mantienen constantes para cualquier número de iteraciones. Se ha contemplado en la sección anterior y en numerosos ejemplos sobre problemas más sencillos, cómo la solución numérica estacionaria coincide con la solución de equilibrio, y que esta es única. En contraposición con los esquemas en diferencias, el modelo numérico integral se comporta en el problema no lineal del mismo modo que el observado en la resolución análoga de ecuaciones de Fokker-Planck lineales que describen procesos de Markov ordinarios. A pesar de que estas ecuaciones lineales se tratan de modo satisfactorio por los esquemas en diferencias habituales, incluso para coeficientes dependientes del tiempo, la presencia de efectos no lineales en los que los coeficientes difusivos dependen de la propia distribución, desvían la solución numérica en diferencias de la solución verdadera, siendo de difícil tasación el error de acotamiento y la propagación del mismo.

La resolución numérica de (4.1) mediante un esquema en diferencias con el que se ha venido operado en todos los problemas tratados (método implícito tipo Crank-Nicholson con el uso de un algoritmo predictor-corrector) no presta la posibilidad de establecer correcciones sobre los elementos de la matriz de evolución para el vector que representa a f . Tales correcciones derivarían posiblemente en una ecuación en diferencias inconsistente con la ecuación original. En cambio, la modificación efectuada sobre la probabilidad de transición a tiempos cortos origina una nueva P_τ interpretable como una función apta en el sentido de distribuciones y que es válida para avanzar en el tiempo la distribución f , en tanto que la nueva P_τ conduce en límite $\tau \rightarrow 0$ a los momentos correctos para la ecuación diferencial de la que, esencialmente, se extrae la información para construir la expresión aproximada del propagador. Mediante el uso de estas correcciones ha sido posible preservar en toda la evolución integral el valor de las magnitudes conservadas del problema continuo, obteniéndose un solución estacionaria f_s de igual energía T_0 que la concedida en $t = 0$ al sistema. La evolución numérica dada por el esquema en diferencias resulta apropiada para la descripción del estado transitorio, ya que los rasgos propios del problema derivan en una pérdida inapreciable de la energía del sistema, siempre que no se aumente el número de iteraciones. Sin embargo, la descripción del estado de equilibrio es inadecuada en tanto que la no conservación de la energía desvía la solución numérica de una solución físicamente aceptable. Es esencial para el estudio sobre los coeficientes de transporte, lo que fundamenta la inves-

tigación de nuevos métodos numéricos, obtener una representación adecuada de cualquier estado de equilibrio (no necesariamente maxwelliano) sobre el que presentará una nueva perspectiva de cálculo, al contar íntegramente con los efectos no lineales. Por esta razón, el esquema en diferencias no ofrece el rigor requerido para una justa interpretación física de los procesos descritos por el término colisional. La pérdida casi lineal de la energía del sistema deriva hacia una solución de equilibrio a la que sólo es posible conferir cierto significado matemático. Ciertamente, al igual que sucede con el problema de la sección 3.4.2(A,B), es sencillo probar que $g = \delta(v)$ es también una solución estacionaria del problema (4.1) sin significado físico posible que, por tanto, no puede ser solución del problema. Numéricamente g se interpreta como el vector $\{1/\Delta v \delta_{1,i}\}$ que es la solución numérica estacionaria hacia la que se aproxima f en el esquema en diferencias, en coherencia con la pérdida sustancial de energía que se profesa a medida que crece el número de iteraciones. Es claro que g representa una solución particular con significado únicamente matemático y en cuyos términos se puede interpretar la solución numérica en diferencias.

La pérdida de energía en cualquier esquema numérico origina inevitablemente, como muestran los trabajos de [12], la incorrecta evolución de las colas de la distribución. En este caso, $f(v, t)$ parece evolucionar, para velocidades altas, más rápidamente que en un esquema conservativo, lo que origina un tiempo de relajación menor que el dado por las primeras investigaciones de W. M. MacDonald y M. N. Rosenbluth [9]. A pesar de que se han presentado en la literatura algunos métodos numéricos en diferencias que mantienen constantes la norma y la energía [13], estos esquemas requieren de un paso temporal muy reducido, lo que alarga en exceso el tiempo de computación. Respecto a los esquemas implícitos en diferencias, recientemente se ha publicado el trabajo [14] en el que se recurre a la linealización del operador colisional.

Al inconveniente de una solución numérica de equilibrio no física, el esquema en diferencias presenta además comportamientos no difusivos para ciertas condiciones iniciales f_0 que se atenúan a medida que avanza el proceso iterativo. Es fácil verificar que tal comportamiento se encuentra para una condición inicial f_0 tipo (3.12), en los límites que marcan la delimitación de la onda cuadrada original, del mismo modo que sucede en un proceso simple tipo Wiener analizado en capítulo 2. Este comportamiento no difusivo persiste durante gran número de iteraciones para valores de τ relativamente grandes, acentuándose si τ aumenta y permaneciendo hasta la solución estacionaria de problemas lineales.

Ninguno de los comportamientos anómalos anteriores se han notado para la solución numérica integral, para cualquier condición inicial f_0 , aun sin el concurso de la autocorrelación Ψ , si analíticamente se ajusta P_τ , en el sentido de redefinir la desviación cuadrática como se propuso en el segundo capítulo. Se ha observado que para $\tau = 0, 1$ y $\Delta v = 0, 05$ con $v^{max} = 6$, la pérdida de energía $T_0 = 1$ es menor del 5 por ciento tras medio millón de iteraciones, desviación justificada por los errores de redondeo, y cuyo control es inmediato si Ψ concursa en el proceso de ajuste para P_τ .

He de subrayar de nuevo que la probabilidad de transición a tiempos cortos, (4.12) representa una aproximación funcional al propagador real Π . Esta aproximación se ve notablemente optimizada por el hecho de que la suposición establecida en el cálculo de P_τ sobre pequeñas variaciones de $|v - v'|$ en la escala temporal τ , está reforzada por las características físicas del operador de Fokker-Planck en la ecuación cinética: el potencial de interacción coulombiano que dirige las colisiones binarias entre las partículas del sistema favorece el débil intercambio

de momento lineal. El decaimiento exponencial de la distribución P_τ en v^2 hace que sólo sean significativos numéricamente los intercambios de momento entre partículas rápidas, lo que confiere al esquema numérico integral una evolución más lenta de las colas de la función $f(v, t)$ que la concedida por la solución numérica del esquema en diferencias.

En la *figura 4.3* se presentan los resultados obtenidos para la evolución de una onda cuadrada inicial para $f(v, 0)$. El paso temporal $\tau = 0,01$ tras 1000 iteraciones conduce a la misma solución que $\tau = 0,1$ en 100 iteraciones. El caso representado corresponde a los parámetros $\tau = 0,1$ y $\Delta v = 0,03$. También se ha representado la función $\alpha(v, t)$ en la que se recoge la variación de los coeficientes de convección y difusión, como se afirma en el texto, pudiendo observarse que éstos permanecen prácticamente inalterados al cabo de pocas iteraciones (véanse las *figuras 4.1* y *4.2*).

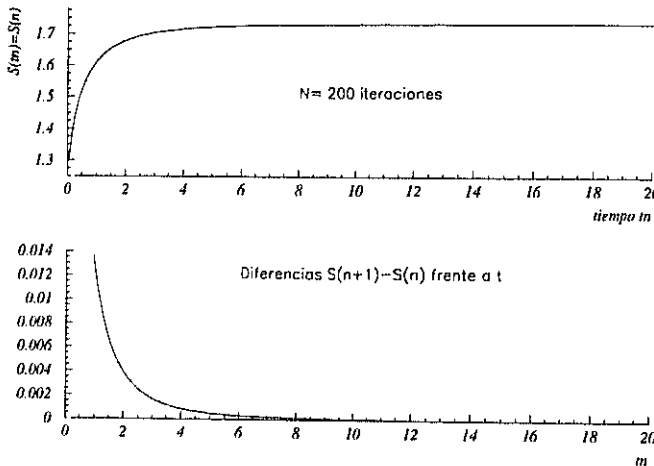


Figura 4.4: Aumento de la entropía $S(t_n)$.

Crecimiento de la entropía $S(t) = - \int f \ln(f) d^3v$ con $\tau = 0,1$ en 200 iteraciones. La gráfica inferior muestra la diferencia $\delta S = S(t + \tau) - S(t)$ frente al tiempo $t = t_n$. Puede apreciarse como δS es siempre positiva, a pesar del elevado valor del paso temporal.

4.6 Conclusiones.

La aplicación del método integral numérico al problema de la ecuación Cinética en la Física del Plasma ha permitido derivar la correcta evolución de la función $f(v, t)$, así como describir el estado de equilibrio maxwelliano, predicho por el Teorema-H de Boltzmann, que puede mantenerse durante un número indefinido de iteraciones. Las condiciones de frontera específicas de la simetría esférica se han introducido directamente en la probabilidad de transición a tiempos cortos. Las propiedades establecidas en los capítulos previos se

4.6. Conclusiones.

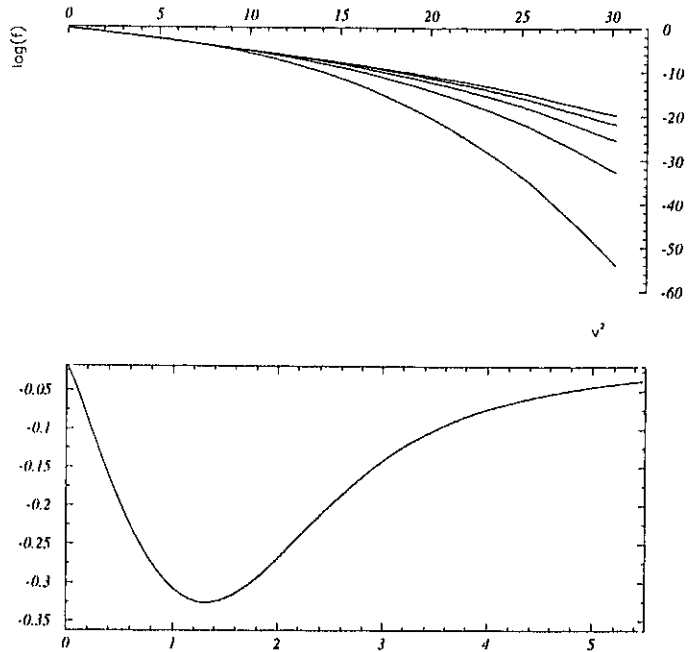


Figura 4.5: Evolución de las colas de f . $\log[f(v, t)]$ frente a v^2 .

La gráfica superior muestra el comportamiento de $\log[f(v, t)]$ frente a v^2 . Se aprecia claramente la evolución de las colas de la distribución es mucho más lenta que la observada en las proximidades de $v = 0$. La curva inferior es el parámetro $-\alpha(v, t)$, casi estacionario a partir de 200 iteraciones.

mantiene para el problema del plasma, como si se tratara de una ecuación diferencial de Fokker-Planck. De forma general quedan establecidas las siguientes conclusiones extensibles a la resolución de problemas en condiciones de simetría menos restrictivas.

- 1.- La probabilidad de transición a tiempos cortos, adaptada a las condiciones de contorno del problema, conduce a la evolución correcta de la función de distribución.
- 2.- Las condiciones de contorno quedan automáticamente implícitas en la función P_T siendo, por tanto, necesario recurrir a artificios numéricos, para reproducir el comportamiento de la función $f(v, t)$ en las fronteras.
- 3.- Se mantiene constante la positividad de la función de distribución, como consecuencia del propio carácter positivo de los elementos de la matriz de evolución $\{Q_{ij}^n\}$.
- 4.- La condición de normalización para la probabilidad de transición se traduce en el mantenimiento constante de la norma elegida para la función de distribución.

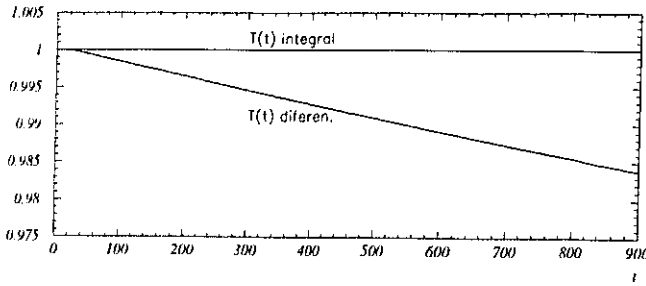


Figura 4.6: *Energía en los esquemas integral y en diferencias.*

comportamiento de la energía T en los esquemas numéricos integral y en diferencias para un tiempo total de 900 unidades, lo que supone 180000 iteraciones (aquí $\tau = 0,005$).

- 5.- El problema se resuelve sin recurrir a ningún tipo de linealización en $f(v, t)$.
- 6.- El procedimiento de ajuste en el parámetro convectivo α sirve para reconducir al sistema de tal modo que permanezca constante la energía cinética total, sin que ello afecte a las tasas convectivo-difusivas, lo que supone no distorsionar la correcta evolución física del problema.
- 7.- La evolución de $f(v, t)$ es físicamente coherente, por lo que no sólo queda resuelto el problema de transición hacia el estado de equilibrio termodinámico, sino que también se ha conseguido la descripción correcta de este último.

Bibliografía.

Bibliografía

- [1] C.F.F. Karney, *Comp, Phys. Rep.* 4(1986),183.
- [2] C.F.F Karney and N.J. Fish, P.P.P.L. report, PPPL-2222(1985).
- [3] F.C. Martínez Dopico, *Métodos Numéricos para Ecuaciones de Fokker-Planck*, tesis doctoral, Universidad Complutense de Madrid, 1992.
- [4] S. Chapman and T.G. Cowling: *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, 3rd. ed., (Cambridge University Press, Cambridge, 1970).
- [5] B.A: Trubnikov, *Reviews of Plasma Physics* 1, vol. I, (Consultants Bureau, New York, 1965). p105
- [6] S.I. Braginskii, *Reviews in Plasma Physics* 1, vol. I, (Consultans Boureau, York, 1965). p205
- [7] J. Heinrichs, *Phys. Rev. E*, 47,5(1992)p.3007
- [8] M. Lax: *Rev. Mod. Phys.* 32,25(1960) (a),38, 359(1966)(b) y 38,541(1966)
- [9] M. N. Rosenbluth, W. M. MacDonald and D. L. Judd, *Phys. Rev.* 107(1961)
- [10] I.S. Gradshteyn, I.M. Ryzhik: *Tables of Integrals, Series and Products*, Academic Press Inc. London(1981).
- [11] Risken, H., *The Fokker-Planck equation*, 2nd. ed., (Springer, 1989)
- [12] T. H. Kho, *Phys. Rev. A* 32 (1985)p.666
- [13] Yu. A. Berezin, V. N. Khudick, and M. S. Pekker, *J. Comput. Phys.* (1987)p.163
- [14] E. M. Epperlein, *Phys. Rev. Lett.* 61(1988)p.2453.

Capítulo 5

Ecuación Cinética en Simetría Cilíndrica.

Este capítulo centra la atención en la ecuación cinética de Fokker-Planck en la Física del Plasma, estudiada bajo una perspectiva más realista que la adoptada en el capítulo anterior. Las condiciones de simetría esférica en el espacio de velocidades representan una imposición poco útil para el tratamiento de la función de distribución del plasma totalmente ionizado. Sólo en las proximidades del equilibrio maxwelliano el tensor de difusión \mathcal{D} para la ecuación cinética (4.1) puede considerarse diagonal en el sistema de coordenadas mencionado, siendo válida la solución obtenida para el régimen transitorio en estas condiciones. Obviamente, para el tratamiento de problemas en los que se requiere el conocimiento de la función f cerca del estado de equilibrio maxwelliano, los requisitos satisfechos por distribución, en cuanto a isotropía en el espacio de velocidades, pueden considerarse válidos. No obstante, para la representación de estados de equilibrio no maxwellianos, f no ofrece la independencia angular total en una geometría esférica. La presencia del campo magnético \mathbf{B} en el plasma induce a la elección de un sistema de coordenadas en el que las dos direcciones características de la velocidad se elijan de forma perpendicular y paralela a la dirección del campo.

Las condiciones de simetría cilíndrica se erigen como la forma natural de la ecuación de Fokker-Planck para aplicaciones prácticas con verdadero significado físico. Por ejemplo, el estudio del transporte en la simetría esférica constituye un mero ejercicio académico, cuya resolución sirve como banco de pruebas para el estudio de nuevos métodos de integración. Asumiendo que f presenta independencia azimutal en torno a la dirección del campo magnético, la elección de la geometría cilíndrica origina un modelo de ecuación cinética más útil, sobre el que pueden estudiarse los efectos de fuerzas exteriores y el calentamiento por radiofrecuencias del plasma. La adición de estos nuevos componentes a la ecuación de Fokker-Planck en condiciones de homogeneidad espacial, es particularmente simple y puede ser estudiada bajo la óptica de un esquema numérico integral cuya robustez para la especificación del estado estacionario se ha venido confirmando a lo largo de la exposición.

La ecuación de Fokker-Planck en simetría cilíndrica da cuenta con suficiente generalidad de los procesos físicos implicados en el tratamiento cinético en un plasma totalmente

ionizado, en el rango de aproximación de las colisiones binarias entre partículas. Con la finalidad de aplicar el modelo de integración numérica presentado en este trabajo a tal ecuación, se ha estudiado el caso del plasma de un solo componente en condiciones de homogeneidad espacial. La extensión de este problema a plasmas de dos o más componentes es inmediata, siempre que la expresión del propagador a tiempos cortos bidimensional P_{τ} quede perfectamente definida. El tratamiento de este problema cierra definitivamente el modo de operar para la implementación numérica integral de la función de distribución. Los preliminares que inducen a la confianza del método para este tipo de problemas se han apuntado ya en los capítulos previos sobre problemas unidimensionales. La generalización a ecuaciones de Fokker-Planck con más de una variable es trivial. De hecho, se han tratado por el mismo procedimiento problemas no lineales con más de una cantidad conservada en el caso bidimensional. Las mismas propiedades inferidas en las ecuaciones unidimensionales siguen siendo válidas para problemas con más de una dimensión. Es evidente que el carácter explícito del método numérico integral resulta ahora más relevante que en los casos anteriores, ya que el esquema numérico no requiere el concurso de procedimientos de inversión matricial. El inconveniente esencial de los esquemas en diferencias implícitos radica precisamente en el cálculo de matriz de evolución inversa, cuando existen derivadas cruzadas para la función f . En estos esquemas se ha de recurrir a representar las derivadas de f en direcciones alternadas para simplificar la inversión de la matriz de evolución, tratando los términos en derivadas cruzadas como explícitos, lo que genera inestabilidades para ciertos valores del paso temporal por encima del mínimo requerido. En cambio, el esquema integral se comporta de un modo similar a los esquemas en diferencias totalmente implícitos, con la ventaja de que las derivadas de f -incluso su comportamiento funcional en las fronteras- se recogen directamente en la representación de la función δ de Dirac de una ecuación de Fokker-Planck auxiliar que da lugar al propagador aproximado P_{τ} , para avanzar la condición inicial f_0 . Son varias las propiedades de relevante interés que justifican el uso del procedimiento numérico integral para la resolución de la ecuación tratada de este capítulo.

El cambio de variables (1.18) y las propiedades de los coeficientes difusivos característicos de la ecuación problema, introducen la determinación del propagador a tiempos cortos. La corrección mediante la función de autocorrelación numérica fija definitivamente la expresión de P_{τ} y contribuye a la mejora del tratamiento de las magnitudes conservadas.

5.1 Cambio de variables.

Al igual que en el capítulo anterior, el estudio que a continuación se presenta está referido a la ecuación cinética de Fokker-Planck para la Física del Plasma en ausencia del término de campo medio, responsable de la interacción con gran número de partículas en una escala temporal relativamente grande comparada con la escala que rige la efectividad de las colisiones binarias. Nuevamente, la ecuación problema se refiere a las condiciones de homogeneidad espacial características de la región central del plasma de un solo componente (electrones). Por otra parte, desde un punto de vista macroscópico el cambio de las coordenadas espaciales de cada partícula del sistema durante el proceso colisional puede considerarse despreciable en la mayoría de los casos. Se estudiará en lo sucesivo la ecuación cinética (1.7) asumiendo que el término $\nabla_{\tau} \cdot v f$, que describe la evolución de f en el espacio físico real, permanece

inalterado, en coincidencia con la argumentación presentada por Trubnikov en la referencia [1]. El movimiento de la distribución de partículas en el espacio de velocidades puede considerarse continuo. Desde el punto de vista matemático esta condición es obvia, ya que f se interpreta como una función densidad de probabilidad para un proceso estocástico descrito por una ecuación tipo Fokker-Planck, expresada en términos de la divergencia de una corriente de probabilidad, en cuyo caso el muestreo de la variable aleatoria $\mathbf{v}(t)$ produce una trayectoria continua en el tiempo. Matemáticamente la ecuación de Fokker-Planck concede al proceso la imposibilidad de que la partícula de coordenadas \mathbf{v} pase a ocupar la posición \mathbf{v}' alejada de \mathbf{v} de forma prácticamente instantánea. Desde el punto de vista de la Física implicada en el proceso, la interpretación anterior es plenamente coherente con la asunción de procesos colisionales gobernados por interacciones coulombianas. La corriente de probabilidad se interpreta como el flujo de partículas del sistema a través de cierta superficie S del espacio de velocidades, en claro paralelismo con una ecuación de continuidad.

Si bien, en cualquier proceso físico la velocidad de una partícula puede cambiar apreciablemente durante una escala de tiempo reducida en una sola colisión, la ecuación problema lleva implícita la característica de que, para partículas coulombianas, un cambio significativo de la velocidad es sólo debido a interacciones en una escala temporal elevada. Los cambios bruscos de velocidad de cada partícula de la colectividad pueden considerarse inexistentes. Este hecho, a su vez, fundamenta la aplicación de la interpretación difusiva asociada a la ecuación de Fokker-Planck, que dista notablemente de los procesos descritos por la ecuación de Boltzmann, en la que \mathbf{v} puede cambiar abruptamente.

Bajo las condiciones prescritas en los párrafos anteriores, la ecuación de Fokker-Planck se escribe como

$$\frac{\partial f}{\partial t} + F_i \frac{\partial f}{\partial v_i} = C(f, f) - \nabla \cdot \mathbf{J}_\omega \quad (5.1)$$

donde \mathbf{F} representa una fuerza exterior por unidad de masa, \mathbf{J}_ω es el flujo inducido por la onda de radiofrecuencias, [2], y $C(f, f)$ es el término colisional de Landau expresable también como la divergencia de una corriente $-\mathbf{J}_c$, como se indica en (1.7). La presencia de fuerzas exteriores, habitualmente debidas a un campo eléctrico uniforme \mathbf{E} paralelo al campo magnético, inducen a la adición de un término convectivo al vector de deriva \mathbf{D} implícito en el término colisional. Por otra parte, la contribución del flujo \mathbf{J}_ω es siempre difusiva. En definitiva, $\partial f / \partial t$ se expresa como la divergencia de una corriente total \mathbf{J} según

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J} \quad \text{donde} \quad \mathbf{J} = \mathbf{J}_\omega + \mathbf{J}_c + \mathbf{F}$$

en la que se contabilizan todos los efectos anteriores. El operador $\nabla = \nabla_v$ actúa en el espacio de velocidades.

Como consecuencia de la simetría azimutal en torno al campo magnético, f se supone dependiente sólo de las componentes v_\perp y v_\parallel de la velocidad, perpendicular y paralela respectivamente, a dicho campo. El sistema de coordenadas apropiado para la descripción de f se refiere pues a las variables $\{v_\perp, v_\parallel, \phi\}$ originadas por un cambio de variables cartesianas a cilíndricas. La conexión con el sistema de coordenadas esféricas $\{v, \theta, \phi\}$ y cartesianas

$\{v_x, v_y, v_z\}$

$$\begin{aligned} v_x &= v_{\perp} \cos\phi = v \sin\theta \cos\phi \\ v_y &= v_{\perp} \sin\phi = v \sin\theta \sin\phi \\ v_z &= v_{\parallel} = v \cos\theta \end{aligned}$$

dan las relaciones entre los elementos del tensor de difusión en coordenadas cilíndricas y esféricas, según

$$\begin{aligned} D_{\perp\perp} &= v_{\perp}^2/v^2 D_{vv} + 2v_{\parallel} v_{\perp}/v^2 D_{\theta v} + v_{\parallel}^2/v^2 D_{\theta\theta} \\ D_{\perp\parallel} &= v_{\perp} v_{\parallel}/v^2 D_{vv} - (v_{\perp}^2 - v_{\parallel}^2)/v^2 D_{\theta v} - v_{\perp} v_{\parallel}/v^2 D_{\theta\theta} \\ D_{\parallel\parallel} &= v_{\parallel}^2/v^2 D_{vv} - 2v_{\parallel} v_{\perp}/v^2 D_{\theta v} + v_{\perp}^2/v^2 D_{\theta\theta} \end{aligned} \quad (5.2)$$

permaneciendo $D_{\phi\phi}$ inalterado. Análogamente, la transformación de las componentes del vector D para ambos sistemas coordenados es

$$\begin{aligned} D_{\perp} &= v_{\perp}/v D_v + v_{\parallel}/v D_{\theta} \\ D_{\parallel} &= v_{\parallel}/v D_v - v_{\perp}/v D_{\theta}. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Utilizando la expresión para la divergencia de un tensor en coordenadas cilíndricas o, alternativamente las ecuaciones del cambio de variables (1.18), la ecuación cinética se reescribe como

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial v_{\perp}} \left\{ D_{\perp}^* - \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} D_{\perp\parallel} - \frac{\partial}{\partial v_{\perp}} D_{\perp\perp} \right\} F(v_{\perp}, v_{\parallel}; t) \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} \left\{ D_{\parallel} - \frac{\partial}{\partial v_{\perp}} D_{\perp\parallel} - \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} D_{\parallel\parallel} \right\} F(v_{\perp}, v_{\parallel}; t) \end{aligned} \quad (5.4)$$

donde se ha definido la nueva función $F = 2\pi v_{\perp} f(v_{\perp}, v_{\parallel}; t)$ que genera una ecuación tipo Fokker-Planck en las variables v_{\perp} y v_{\parallel} . La nueva convección formal asociada a la variable v_{\perp} , notada por D_{\perp}^* , presenta la forma

$$D_{\perp}^* = \frac{D_{\phi\phi}}{v_{\perp}} + D_{\perp}$$

en claro paralelismo con la definición de D_v^* en el caso con simetría esférica en el espacio de velocidades.

En ausencia de fuerzas exteriores, suponiendo $J_{\omega} = 0$, el flujo J cuenta sólo con la contribución del término colisional J_c . Los elementos del tensor \mathcal{D} y del vector de convección D se obtienen a partir de los potenciales de Rosenbluth (1.8) $\varphi(v_{\perp}, v_{\parallel}; t)$ y $\psi(v_{\perp}, v_{\parallel}; t)$. Si se adopta de nuevo el sistema de unidades (4.13) del capítulo anterior, tales coeficientes adimensionales se determinan mediante las relaciones

$$\begin{aligned} D_{\alpha} &= -2 \frac{\partial \varphi}{\partial v_{\alpha}} & D_{\alpha\beta} &= -\frac{\partial}{\partial v_{\alpha}} \frac{\partial \psi}{\partial v_{\beta}} \\ D_{\phi\phi} &= -\frac{1}{v_{\perp}} \frac{\partial \psi}{\partial v_{\perp}}, & \alpha, \beta &= \perp, \parallel. \end{aligned} \quad (5.5)$$

En dicho sistema de unidades, los potenciales de Rosenbluth se redefinen de modo que ambos mantienen formalmente las expresiones asociadas a los mismos con las unidades físicas reales, esto es:

$$\psi = -\frac{1}{8\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} |\mathbf{v} - \mathbf{v}'| v'_{\perp} f(v'_{\perp}, v'_{\parallel}; t) dv'_{\parallel} dv'_{\perp} d\phi' \quad (5.6)$$

$$\varphi = -\frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \frac{1}{|\underline{\mathbf{v}} - \underline{\mathbf{v}}'|} v'_{\perp} f(v'_{\perp}, v'_{\parallel}; t) dv'_{\parallel} dv'_{\perp} d\phi' \quad (5.7)$$

$$|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|^2 = v_{\perp}^2 - 2 v_{\perp} v'_{\perp} \cos(\phi - \phi') + v_{\perp}'^2 + (v_{\parallel} - v'_{\parallel})^2.$$

Si \mathbf{J} cuenta únicamente con la contribución debida a las colisiones binarias entre las partículas del sistema, la ecuación (5.1) adopta la forma alternativa

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial v_{\perp}} \left[\frac{D_{\perp\perp}}{v_{\perp}} + \frac{D_{\perp}}{2} - D_{\perp\parallel} \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} - D_{\perp\perp} \frac{\partial}{\partial v_{\perp}} \right] F(v_{\perp}, v_{\parallel}; t) \\ & -\frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} \left[\frac{D_{\perp\parallel}}{v_{\perp}} + \frac{D_{\parallel}}{2} - D_{\perp\parallel} \frac{\partial}{\partial v_{\perp}} - D_{\parallel\parallel} \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} \right] F(v_{\perp}, v_{\parallel}; t) \end{aligned} \quad (5.8)$$

donde se ha hecho uso de la relación entre la divergencia del tensor de difusión \mathcal{D} y el vector de deriva \mathbf{D} , que se traduce para cada componente D_{α} en

$$D_{\alpha} = 2 [\nabla \cdot \mathcal{D}]_{\alpha}, \quad (5.9)$$

satisfecha en virtud de la propiedad $\nabla^2 \psi = \varphi$ para los potenciales de Rosenbluth. No obstante, con la finalidad de aplicar el método de cálculo propuesto en el segundo capítulo para determinar la expresión aproximada del propagador a tiempos cortos P_{τ} , se ha optado por preservar la forma dada en (5.4). Como ha venido siendo habitual a lo largo de toda la exposición; la representación de la función $\delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}')$ ha de incluir en sí misma todas las derivadas que afecten a los coeficientes de difusión en la ecuación de Fokker-Planck y por ello es conveniente que todos los coeficientes $D_{\alpha\beta} f$ se hallen a la derecha del operador $\partial^2 / \partial v_{\alpha} \partial v_{\beta}$. La interconversión de ambas expresiones para $\mathbf{J}_{\omega} \neq 0$, posiblemente con la presencia de fuerzas exteriores, ha de hacerse a través de la redefinición de las convecciones formales D_{\perp}^* y D_{\parallel} asociadas a la ecuación (5.8) en $F(v_{\perp}, v_{\parallel}; t)$. Si el flujo \mathbf{J}_{ω} se da como

$$\mathbf{J}_{\omega} = -\mathbf{D}_{\omega} \cdot \nabla f$$

[2], éste se modificará de tal forma que, suponiendo los elementos del tensor \mathbf{D}_{ω} dependientes de \mathbf{v} , se reescriba según

$$\mathbf{J}_{\omega} = \mathbf{D}_{\omega} f - \nabla \cdot \mathbf{D}_{\omega} f,$$

que presenta un término convectivo formal o espúreo \mathbf{D}_{ω} , inducido por las condiciones de geometría. De este modo, la corriente total \mathbf{J} es formalmente análoga a la misma para el término colisional sin calentamiento adicional y sin fuerzas exteriores

$$\mathbf{J} = \mathbf{D}^* f - \nabla \cdot \mathbf{D}^* f$$

con $\mathbf{D}^* = \mathbf{D} + \mathbf{D}_\omega + \mathbf{F}$ y $D^* = D + D_\omega$

En lo sucesivo, la ecuación problema se reducirá a aquélla en la que sólo se cuenta con el término colisional. La aplicación de la matriz de evolución para el método numérico integral puede extenderse fácilmente al problema general sin más que proceder en la forma indicada en el párrafo anterior. El objeto esencial de este trabajo es fundamentar e ilustrar la aplicabilidad del método numérico integral. No se pretende, por tanto, variar los parámetros característicos del sistema con el fin de estudiar un comportamiento físico determinado. Se desea establecer la eficiencia del nuevo modelo para la descripción de los regímenes transitorio y estacionario sobre un sistema con magnitudes conservadas. Por ello, abordar la ecuación cinética con la presencia única del término colisional de Landau presta sencillez al desarrollo en la resolución de un problema en la distribución f , que confluye a una única solución de equilibrio. La simplificación de la física contenida en la ecuación original (5.1) no colleva en modo alguno la limitación del conjunto de problemas en el que el método resulta eficiente, pero sí contribuye a la claridad y transparencia en la observación de las pautas a seguir cuando se desee profundizar en la física no lineal implícita en la ecuación Cinética, lo que constituye el objetivo inmediato de nuestro grupo.

Las condiciones dadas en el párrafo anterior, en virtud del Teorema-H de Boltzmann [3], dirigen la evolución de f hasta la solución de equilibrio maxwelliano

$$F(v_\perp, v_\parallel; t) = v_\perp \frac{1}{T_\perp \sqrt{2\pi T_\parallel}} \exp\left\{-\left[\frac{v_\perp^2}{2T_\perp} + \frac{v_\parallel^2}{2T_\parallel}\right]\right\} \quad (5.10)$$

con $T_\perp = T_\parallel = T$. La constante T se refiere a la temperatura isótropa o energía media de la distribución, que coincidirá con la unidad en el sistema de unidades establecido por (4.13). Las temperaturas anisótropas transversal y longitudinal T_\perp y T_\parallel , así como la temperatura T se han definido, en la forma habitual

$$\begin{aligned} T_\perp &= \frac{1}{2} \int \int v_\perp^2 F dv_\perp dv_\parallel = \frac{1}{2} \langle v_x^2 + v_y^2 \rangle \\ T_\parallel &= \int \int v_\parallel^2 F dv_\perp dv_\parallel = \langle v_z^2 \rangle \\ T &= \frac{1}{3} \int \int v^2 F dv_\perp dv_\parallel = \frac{2}{3} T_\perp + \frac{1}{3} T_\parallel . \end{aligned} \quad (5.11)$$

La energía media del sistema ha de mantenerse constante en toda la evolución. Dado que D_i y D_{ij} representan los incrementos colisionales de la velocidad $\langle \Delta v_i \rangle$ y $\langle \Delta v_i \Delta v_j \rangle / 2$ de una partícula testigo del sistema por unidad de tiempo, las tasas de variación temporal para las transferencias de momento y energía para una sola partícula son proporcionales respectivamente a las cantidades

$$\frac{dv_i}{dt} = D_i$$

y

$$\frac{dv^2}{dt} = 2(D_{ii} + v_i D_i), \quad (\text{suma en } i = x, y, z)$$

lo que conduce, para el sistema global —si f' denota la función $f(\mathbf{v}', t)$ — a

$$\frac{d}{dt} \langle v \rangle = \langle D \rangle = -\frac{1}{2\pi} \int \int \frac{\mathbf{v} - \mathbf{v}'}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|^3} f f' d\mathbf{v} d\mathbf{v}' = 0$$

$$\frac{d}{dt}\langle v^2 \rangle = 2\langle D_{ii} + v_i D_i \rangle = \frac{1}{2\pi} \int \int \frac{v'^2 - v^2}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|^3} f f' d\mathbf{v} d\mathbf{v}' = 0.$$

En el sistema coordenado $\{v_\perp, v_\parallel, \phi\}$ las únicas cantidades conservadas del sistema, exceptuando la norma unidad de f , serán $\langle v_\parallel \rangle$ y $\langle v^2 \rangle = 3T$. Los momentos $\langle v_\parallel^2 \rangle$ y $\langle v_\perp^2 \rangle$ han de evolucionar en el tiempo según la ley

$$\frac{d}{dt}\langle v_\perp^2 \rangle = 2\frac{d}{dt}T_\perp = -\frac{d}{dt}\langle v_\parallel^2 \rangle = -\frac{d}{dt}T_\parallel \quad (5.12)$$

en concreto, las variaciones temporales independientes de dichos momentos están regidas por las ecuaciones

$$\frac{d}{dt}\langle v_\perp^2 \rangle = 2\langle D_{\perp\perp} + D_{\phi\phi} + v_\perp D_\perp \rangle, \quad \frac{d}{dt}\langle v_\parallel^2 \rangle = 2\langle D_{\parallel\parallel} + v_\parallel D_\parallel \rangle. \quad (5.13)$$

Cualquiera que sea la condición inicial f_0 , la función de distribución evoluciona en el sentido que marque la transformación gradual de f en la distribución maxwelliana (5.10) con $T_\perp = T_\parallel = T$, en concordancia con el requisito del *aumento* en la *entropía* del sistema. En este sentido puede hablarse de un tiempo básico global de *relajación* τ_r como distintivo del tiempo que tarda f_0 en aproximarse a la solución de equilibrio. En las magnitudes adimensionales del problema, τ_r es del orden de $\tau_r \approx 16\pi/\sqrt{2} \simeq 35,5$ que en unidades reales es $\tau_r a^3 / (nL^e/e)$ donde a es la velocidad térmica $\sqrt{KT/m}$ y n la densidad de partículas. En general, f_0 define una distribución inicial para la cual la diferencia $\Delta T_0 = T_\perp^0 - T_\parallel^0$ es distinta de cero. Es común tratar con un tiempo de *termalización* τ_t que orienta sobre el tiempo de isopropización del sistema. Para pequeños valores de la diferencia ΔT , si se opta por representar f_0 en la forma (5.10), la referencia [1] muestra que $T_\perp - T_\parallel$ decaea exponencialmente de acuerdo con la ley

$$T_\perp - T_\parallel = \Delta T_0 \exp(-t/\tau_t)$$

donde τ_t es una medida del tiempo que tarda la diferencia entre las temperaturas transversales en reducirse en un factor e , cuyo valor resulta ser del orden de

$$\tau_t = \frac{5}{8} \sqrt{2\pi} \tau_r \approx 1,566 \tau_r.$$

Si bien estas estimaciones son sólo orientativas —ya que no se conoce solución analítica para f — pueden ser empleadas para el ajuste del paso temporal τ del esquema numérico. El valor relativamente grande del tiempo de relajación adimensional y las características del sistema relativas a la débil variación de los coeficientes difusivos en el tiempo, así como las características alusivas a la estabilidad del método integral, permitirán tomar valores de τ mayores que los utilizados habitualmente en esquemas en diferencias. Por otra parte, las leyes de evolución para las temperaturas transversales y la energía media del sistema, serán útiles para calibrar la velocidad de evolución de la solución numérica hacia la solución de equilibrio, con el fin de comparar con la evolución real de f esperada en el problema continuo.

5.2 Cálculo de los coeficientes de difusión y deriva.

Los métodos semianalíticos básicos para la resolución de la Ecuación Integral de Fokker-Planck en la Física del Plasma están regidos por la opción de representar el término colisional de Landau bajo la perspectiva de linealizaciones que merman el contenido físico real de los procesos implícitos en el problema. Es habitual recurrir a desarrollos multipolares de la función de distribución truncados hasta cierto orden, lo que obliga a correcciones en f para mantener las propiedades conservativas del operador colisional. Los desarrollos perturbativos de la función f en torno a la distribución maxwelliana de equilibrio se caracterizan también por aproximaciones que fuerzan la conservación de la norma y la energía. Estos últimos procedimientos son esencialmente aplicados para la determinación de los coeficientes de transporte que caracterizan al plasma. En condiciones de equilibrio no maxwelliano el problema llega a ser irresoluble de forma analítica. En este sentido se han desarrollado numerosos procedimientos de integración numérica que intentan ser consistentes con toda la física involucrada en la ecuación alinear. Los métodos en diferencias se ven obstaculizados esencialmente por la imposibilidad práctica de recurrir a esquemas implícitos que deriven en una matriz de evolución fácilmente invertible. La presencia del coeficiente difusivo $D_{\perp\parallel}$ en (5.1) origina un término con derivada cruzada en las variables v_{\parallel} y v_{\perp} que hace improcedente cualquier método implícito en diferencias, pues el procedimiento de eliminación de Gauss para la matriz de evolución resulta inoperante. En este caso se recurre a modelos en los que este término se trata de forma explícita, imponiendo una limitación obvia sobre el valor del paso temporal, como muestra la referencia [2]. Un acercamiento al problema lo concede el método de integración basado en elementos finitos que en el caso del plasma da lugar a resultados similares a los encontrados por los métodos en diferencias finitas (véase la discusión de Karney en [2].) A la vista de tales dificultades el objetivo primordial del método integral ha de ser, al menos, solventar los problemas de inestabilidad acaecidos en los esquemas en diferencias y derivar un algoritmo que genere una solución numérica acorde con las características conservativas del operador para el caso continuo.

El primer obstáculo en la consecución de estos fines se halla en la aproximación numérica con la que ha de representarse el término colisional de Landau, lo que equivale a diseñar un proceso de cálculo físicamente aceptable para los coeficientes de difusión y convección $D_{\alpha\beta}$ y D_{α} —los subíndices griegos se refieren a las coordenadas cilíndricas.— La primera alternativa ofrecida en la literatura sobre el tema presta la posibilidad de recurrir a la descomposición de $F(v\sin\theta, v\cos\theta; t)$ en series de armónicos esféricos, representados por Polinomios de Legendre y calcular así los potenciales de Rosenbluth. Este cálculo impone truncar cada serie hasta cierto orden K de potencias en v . Karney ofrece la posibilidad de cortar la serie en $K = 10$ y aplicar las relaciones (5.2) y (5.3) para determinar los coeficientes difusivos en coordenadas cilíndricas. Dado que el truncamiento de la serie puede suponer una propagación de errores que afecte a las leyes de conservación para la energía y la norma, se ha optado por calcular numéricamente las integrales presentes en el operador colisional contabilizando a priori, esto es, antes del proceso de implimentación temporal, cada integral angular en ϕ' , dada la independendencia azimutal de F . Un inconveniente adicional se presenta en el cálculo numérico de las derivadas de los potenciales φ y ψ que suponen la aproximación en diferencias de las derivadas en (5.5). Por esta razón es conveniente presentar todas las operaciones de forma integral, al igual que el esquema de avance temporal

para F , e integrar directamente las expresiones analíticas originadas por (5.5). A pesar de que el número de integraciones numéricas aumenta considerablemente, esta pauta de operación es más consistente con los rasgos del esquema integral que el cálculo por derivadas numéricas de los potenciales de Rosenbluth. En definitiva, se ha actuado de igual modo que el propuesto en el capítulo anterior en la sección donde se calculan los coeficientes D_{vv} y A_v para una distribución isótropa $f(|\mathbf{v}|, t)$. Por otra parte, como se mostró en aquella sección, las propiedades conservativas del operador colisional se exhiben claramente sin el recurso de redefinir los coeficientes difusivos, o la propia función f , en las fronteras de la retícula.

En las relaciones (5.5) se contemplan implícitamente las expresiones de las que se infieren por integración directa cada uno de los coeficientes D_α y $D_{\alpha\beta}$. Por aplicación de estas relaciones sobre (5.8) se tiene

$$D_\alpha = -\frac{2}{4\pi} \int \frac{u_\alpha}{u^3} f(v'_\perp, v'_\parallel; t) dv' \quad (5.14)$$

$$D_{\alpha\beta} = \frac{1}{8\pi} \int \frac{u^2 \delta_{\alpha\beta} - u_\alpha u_\beta}{u^3} f(v'_\perp, v'_\parallel; t) dv' \quad (5.15)$$

donde u representa la módulo del vector $\mathbf{v} - \mathbf{v}'$ y dv' el elemento de volumen $v'_\perp dv'_\perp dv'_\parallel$. Si se opta por tomar las componentes v_\perp y v_\parallel del vector \mathbf{v} sobre los ejes y y z de un sistema coordinado arbitrario, la integración a todo el espacio de velocidades en \mathbf{v}' ha de contar con las relaciones

$$u = |\mathbf{v} - \mathbf{v}'|^2 = v_\perp^2 - 2v_\perp v'_\perp \cos \phi' + v_\perp'^2 + (v_\parallel - v'_\parallel)^2$$

$$u_\perp = \mathbf{u} \cdot \hat{e}_\perp = v_\perp - v'_\perp \cos \phi'$$

$$u_\parallel = \mathbf{u} \cdot \hat{e}_\parallel = v_\parallel - v'_\parallel$$

$$u_\phi = \mathbf{u} \cdot \hat{e}_\phi = -v'_\perp \sin \phi'$$

en las que se ha implicado la representación en coordenadas cilíndricas del vector \mathbf{v}' y se ha hecho $\phi = 0$, ya que la presencia del ángulo azimutal ($0 \leq \phi \leq 2\pi$) no afecta a las integrales anteriores. La proporcionalidad en $\sin \phi'$ de u_ϕ hace que los coeficientes D_ϕ , $D_{\perp\phi}$, y $D_{\parallel\phi}$ sean idénticamente nulos. De esta forma sólo se requiere el cómputo de seis coeficientes en lugar de los nueve que aparecerían sin la simplificación de la simetría cilíndrica. Se advierte fácilmente que la integración sobre ϕ' puede llevarse a cabo de forma directa y reducir cada integral tridimensional a una integral en dos dimensiones sobre las variables v'_\perp y v'_\parallel . Si se define el parámetro funcional $m(v_\perp, v_\parallel | v'_\perp, v'_\parallel)$ en la forma

$$m = \frac{2v_\perp v'_\perp}{v_\perp^2 + v_\perp'^2 + (v_\parallel - v'_\parallel)^2}, \quad 0 \leq m \leq 1$$

todas las integrales se expresan en términos de la función

$$E(n|m) = \int_0^{2\pi} \frac{\cos^n \phi'}{(1 - m \cos \phi')^{3/2}} d\phi'$$

con $n = 0, 1, 2$ — resoluble en términos de *integrales elípticas*. Realmente, el conocimiento de las tres integrales $E(0|m)$, $E(1|m)$, y $E(2|m)$ resuelve el problema de la eliminación de las variables angulares. Como cada integral de tipo elíptico es independiente de F , conviene proceder a resolver numéricamente $E(n|m)$ para M valores del parámetro m comprendidos entre 0 y 1 e interpolar linealmente para cualquier valor real de m , obtenido al evaluar este parámetro dependiente de v_{\perp} , v'_{\perp} y de $|v_{\parallel} - v'_{\parallel}|$. Definitivamente, los coeficientes difusivos pueden evaluarse en cada paso temporal en la forma

$$D_{\alpha\beta} = \iint d_{\alpha\beta}(v_{\perp}, v'_{\perp}, |v_{\parallel} - v'_{\parallel}|) f(v_{\perp}, v_{\parallel}; t) v'_{\perp} dv'_{\perp} dv'_{\parallel} \quad (5.16)$$

$$D_{\alpha} = \iint d_{\alpha}(v_{\perp}, v'_{\perp}, |v_{\parallel} - v'_{\parallel}|) f(v_{\perp}, v_{\parallel}; t) v'_{\perp} dv'_{\perp} dv'_{\parallel}$$

donde las seis funciones $\{d\}$ son independientes del tiempo, por lo que pueden ser archivadas en memoria como vectores de tres índices, o recalculadas en cada iteración si se opta por dimensionar únicamente las tres integrales de tipo elíptico ($n = 0, 1, 2$)

$$I(n) = \frac{1}{4\pi} \left[\frac{m}{2v_{\perp} v'_{\perp}} \right]^{3/2} \int_0^{\pi} \frac{\cos^n \phi}{[1 - m \cos \phi]^{3/2}} d\phi \quad (5.17)$$

de las que se desprenden las definiciones de las funciones auxiliares

$$\{d\} = \left[\begin{array}{l} d_{\perp\perp} = (u_{\parallel}^2 + v_{\perp}'^2) I(0) - v_{\perp}'^2 I(2) \\ d_{\perp\parallel} = -u_{\parallel} (v_{\perp} I(0) - v_{\perp}' I(1)) \\ d_{\parallel\parallel} = (v_{\perp}^2 + v_{\perp}'^2) I(0) - 2v_{\perp}' v_{\perp} I(1) \\ d_{\phi\phi} = (v_{\perp}^2 + u_{\parallel}^2) I(0) - 2v_{\perp}' v_{\perp} I(1) + v_{\perp}'^2 I(2) \\ d_{\perp} = -4v_{\perp} I(0) + 4v_{\perp}' I(1) \quad \text{y} \quad d_{\parallel} = -4u_{\parallel} I(0) \end{array} \right] \quad (5.18)$$

Las integrales de (5.16) se resuelven mediante la aplicación de la Regla Extendida del Punto Medio, de este modo la integral que define el valor medio de $D_{\alpha\alpha} + v_{\alpha} D_{\alpha}$ proporcional a dT/dt según (5.13) es idénticamente nula, ya que

$$d_{\alpha\alpha} + v_{\alpha} d_{\alpha} = -2(v^2 - v'^2) I(0);$$

dados que $I(0)$ no cambia si se mutan entre sí las variables v'_{\perp} con v_{\perp} y v_{\parallel} con v'_{\parallel} , se tiene ($d^2\mathbf{v} = dv_{\perp} dv_{\parallel}$)

$$\int (D_{\alpha\alpha} + v_{\alpha} D_{\alpha}) F d^2\mathbf{v} = -2 \int \int (v^2 - v'^2) I(0) F F' d^2\mathbf{v} d^2\mathbf{v}' = 0$$

como se afirmó. El resultado se mantiene para el esquema de integración por rectángulos: la suma sobre cuatro índices que define la fórmula de cuadratura para la expresión anterior es nula, independientemente del número de puntos M que se utilicen en la interpolación de las integrales de tipo elíptico. Basta tomar $M \sim 100$ para que la interpolación lineal en el argumento m de las tres funciones elípticas numéricas se aproximen notablemente a sus valores reales.

La integración sobre ϕ' en $E(n|m)$ puede hacerse también analíticamente, expresando estas funciones en términos de las integrales elípticas analíticas, que se tasarían mediante las aproximaciones que al efecto se han desarrollado en la literatura para computación de funciones especiales. La complejidad de esta alternativa redundaría en un cálculo tedioso e innecesario, pues el orden de aproximación de la integración numérica en ϕ puede superar al dispensado por estas expresiones semianalíticas, siendo menor el tiempo de computación aun para una red muy fina ($\Delta\phi \sim 10^{-5}$).

El conjunto de funciones $\{ d \}$ equivale a las funciones G_A y G_D definidas en el capítulo anterior para el cálculo de los coeficiente $D_{\nu\nu}$ y A en la ecuación integral de Fokker-Planck sobre la distribución isotrópica $f(v, t)$. En las figuras 5.1 y 5.2 se han representado los coeficientes difusivos antes de alcanzar el estado estacionario para el caso que se ilustra en las gráficas siguientes.

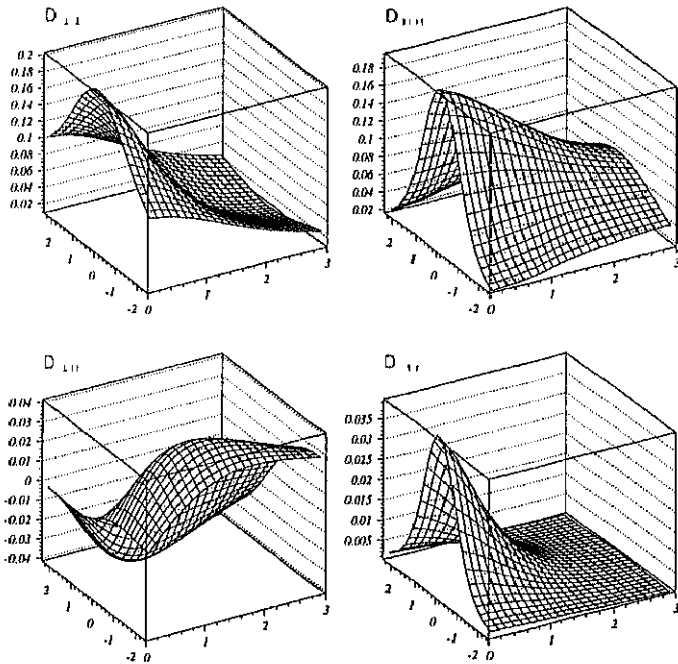


Figura 5.1; Coeficientes de difusión $D_{\alpha\beta}$ en simetría cilíndrica.

Detalle en $(0, 3) \times (-2, 2)$ de los coeficientes de difusión $D_{\alpha\beta}$ y del determinante D_t , tras 20 iteraciones.

Al igual que en el problema con simetría esférica, la discretización de las variables no distorsiona la naturaleza conservativa del operador colisional. Este hecho es esencial para el ajuste iterativo de la función de autocorrelación numérica que optimiza recursivamente la expresión del propagador a tiempos cortos en el transcurso de la implementación de f . La

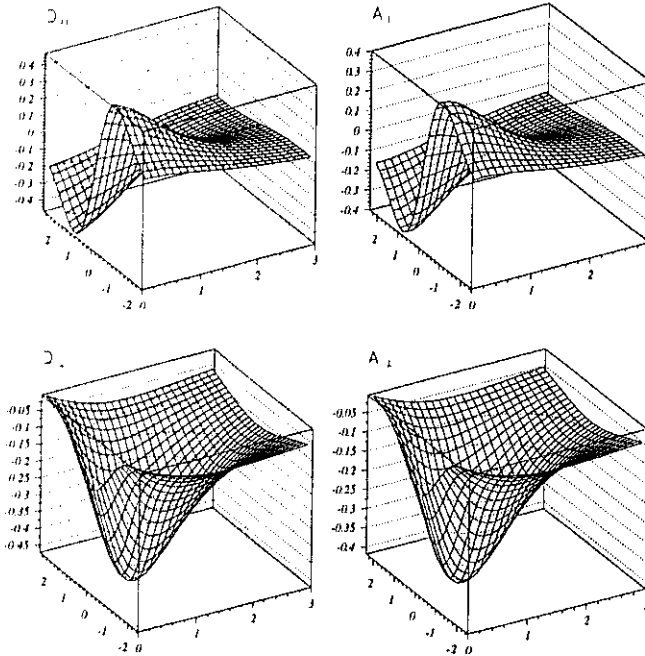


Figura 5.2: Coeficientes de deriva.

Componentes radial y axial del vector de convección real D y del vector efectivo de deriva A utilizado en el propagador P_r .

complejidad añadida por el uso de la geometría cilíndrica eleva notablemente el tiempo de computación, ya que el número de integraciones para el cálculo de los coeficientes difusivos aumenta en un factor $3N^2$ —supuesta la retícula uniforme con $v_i = N \Delta v$ —. De hecho, el cálculo de estos coeficientes consume el mayor tiempo de computación del programa. Estrictamente, es necesario evaluar en cada paso temporal los seis coeficientes característicos de la ecuación problema, sin embargo, como se anotó en los preliminares del capítulo, estos coeficientes varían lentamente con el tiempo, característica que se aprecia ostensiblemente en el caso esférico, por lo que realmente sólo será necesario evaluarlos durante las primeras iteraciones en cada paso y calcularlos cada cierto número de pasos cuando la solución numérica se aproxime al equilibrio. En el equilibrio es posible conocer las expresiones analíticas de los elementos del tensor de difusión y del vector de deriva, ya que f representa una función isotrópica dependiente sólo de v . Mediante las relaciones (4.15) y las ecuaciones de transformación (5.2) y (5.3) en las proximidades del equilibrio maxwelliano se tiene ($D_{v\theta} = 0$, $D_\theta = 0$)

$$D_{\perp\perp} = s^2 D_{vv} + c^2 D_{\theta\theta} \quad D_{\perp\parallel} = sc(D_{vv} - D_{\theta\theta}) \quad D_{\parallel\parallel} = c^2 D_{vv} + s^2 D_{\theta\theta}$$

$$D_{\perp} = -2v_{\perp} D_{vv} \quad D_{\parallel} = -2v_{\parallel} D_{vv} \quad D_{\phi\phi} = D_{\theta\theta}$$

donde $s = \sin \theta = v_{\perp}/v$ y $c = \cos \theta = v_{\parallel}/v$. En el sistema normalizado de unidades los coeficientes difusivos no nulos en el equilibrio (en coordenadas esféricas) adquieren las expresiones

$$D_{vv} = \frac{1}{4\pi v^3} \text{fer}\left(\frac{v}{\sqrt{2}}\right) - \frac{\sqrt{2} e^{-v^2/2}}{4\pi \sqrt{\pi} v^2}$$

$$D_{\theta\theta} = \frac{1}{8\pi v} \text{fer}\left(\frac{v}{\sqrt{2}}\right) - \frac{D_{vv}}{2}, \quad D_v = -2v D_{vv}$$

En sencillo probar que las componentes del vector de convección para la solución de equilibrio satisfacen, alternativamente, las identidades

$$D_{\perp} = -2 \left[\frac{v_{\perp}}{T_{\perp}} D_{\perp\perp} + \frac{v_{\parallel}}{T_{\parallel}} D_{\perp\parallel} \right] \quad \text{y} \quad D_{\parallel} = -2 \left[\frac{v_{\perp}}{T_{\perp}} D_{\perp\parallel} + \frac{v_{\parallel}}{T_{\parallel}} D_{\parallel\parallel} \right] \quad (5.19)$$

junto con $D_{\phi\phi} = D_{\theta\theta}$, sustituidas en (5.4) o en (5.8) con $T_{\perp} = T_{\parallel} = T$ anulan el flujo \mathbf{J} en cualquier punto \mathbf{v} , como cabría esperar. Opcionalmente, (5.19) proporciona una relación que puede aplicarse para evaluar los coeficientes de deriva en todo instante t sustituyendo T_{\perp} y T_{\parallel} por $T_{\perp}(t)$ y $T_{\parallel}(t)$. Esta opción reduce el tiempo de cálculo de los coeficientes difusivos, contabilizando los efectos de la no linealidad en la ecuación problema de forma más aproximada que la ejercida por el uso de un operador colisional quasi-lineal en torno a la situación de equilibrio, $C_{lin}(f_{Maxw}, f)$, tan habitual en la literatura (véase, por ejemplo, [2]).

Las identidades anteriores orientan sobre la dependencia funcional en las variables v_{\perp} y v_{\parallel} de los coeficientes de difusión y convección relativos a la ecuación integro-diferencial de Fokker-Planck. Los comportamientos asintóticos de estos coeficientes difusivos, en las fronteras del espacio de velocidades, se mantienen para cualquier instante t de la evolución, siempre que $f(\mathbf{v}, t)$ sea una función bien definida en el sentido de distribuciones. Este rasgo, apreciado ya en el capítulo anterior, es fundamental para definir una probabilidad de transición a tiempos cortos P_τ óptima para el avance de la distribución inicial f_0 .

5.3 El propagador P_τ en simetría cilíndrica.

Una vez obtenida la ecuación de evolución en diferencias progresivas para la nueva distribución F , en las variables $(v_{\perp}, v_{\parallel})$, se requiere determinar la expresión del propagador P_τ adecuado para el avance temporal de la condición inicial F_0 . Al igual que en el problema equivalente en simetría esférica, la probabilidad de transición ha de contener en sí misma las condiciones de contorno que permitan mantener constante la norma inicial de la distribución. En este caso, la corriente de probabilidad \mathbf{J} , en sentido matemático, o el flujo de partículas en sentido físico, ha de anularse en las fronteras de la superficie S que limita el espacio de velocidades, esto es

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{J}(S) = 0$$

donde \mathbf{n} representa el vector unitario normal a la superficie S . En particular, se tendrá

$$\begin{aligned}\lim_{v_{\perp} \rightarrow 0} j_{\perp}(v_{\perp}, v_{\parallel}; t) &= 0 \\ \lim_{v_{\perp} \rightarrow \infty} j_{\perp}(v_{\perp}, v_{\parallel}; t) &= 0 \\ \lim_{v_{\parallel} \rightarrow \pm\infty} j_{\parallel}(v_{\perp}, v_{\parallel}; t) &= 0\end{aligned}$$

donde j_{\perp} y j_{\parallel} representan las componentes del vector \mathbf{j} , que da lugar a la expresión alternativa para la ecuación (5.4) en el propagador $\Pi = P(\mathbf{v}, t | \mathbf{v}', t')$ en la forma

$$\dot{P} = -\frac{\partial j_{\perp}}{\partial v_{\perp}} - \frac{\partial j_{\parallel}}{\partial v_{\parallel}} = -\nabla_{\text{cil}} \mathbf{j}, \quad (5.20)$$

∇_{cil} es el operador $(\partial / \partial v_{\perp}, \partial / \partial v_{\parallel})$, análogo formal al operador ∇ en coordenadas cartesianas. De (5.4) se desprenden las relaciones

$$\begin{aligned}j_{\perp} &= \left[\frac{D_{\phi\phi}}{v_{\perp}} + D_{\perp} - \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} D_{\perp\parallel} - \frac{\partial}{\partial v_{\perp}} D_{\perp\perp} \right] P \\ j_{\parallel} &= \left[D_{\parallel} - \frac{\partial}{\partial v_{\perp}} D_{\perp\parallel} - \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} D_{\parallel\parallel} \right] P\end{aligned}$$

donde los términos D_{α} y $D_{\alpha\beta}$ dependen de t a través de la propia distribución F .

La forma del propagador Π para pequeños valores en la diferencia $t - t'$ podría obtenerse integrando sobre las variables angulares la expresión de la probabilidad de transición habitual a tiempos cortos (2.13), cuando dicha expresión se reescribe en términos de las coordenadas cilíndricas características del problema. Este procedimiento tropieza con inconvenientes equivalentes a los surgidos para consumir este propósito en el problema con simetría esférica. En este caso, el argumento de la exponencial para dicha probabilidad

$$-\frac{1}{4\tau} D_{\alpha\beta}^{-1} U_{\alpha} U_{\beta} \quad \text{con} \quad \mathbf{U} = \mathbf{v} - \mathbf{v}' - \mathbf{D} \tau$$

da lugar a integrales angulares del tipo

$$I(a, b) = \int_0^{2\pi} e^{a \cos(\theta) + b \sin^2(\theta)} d\theta$$

donde a y b dependen de $D_{\perp\perp}$, $D_{\perp\parallel}$, $D_{\phi\phi}$ y D_{\perp} evaluados en las variables primadas. La integral $I(a, b)$ se traduce analíticamente en una serie de funciones de Bessel $I_n(z)$ de segunda clase y de orden n en la forma

$$I(a, b) = 2\sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{2b}{a} \right]^n \frac{\Gamma(n + \frac{1}{2})}{\Gamma(n + 1)} I_n(a) \quad (5.21)$$

que se reduce a un único sumando en $I_0(a)$ si $b = 0$. La expresión anterior resulta a todas luces inoperante para evaluar en cada paso temporal el operador integral de evolución que

permite avanzar en el tiempo la distribución. Sólo si el tensor $\mathcal{D}^{-\infty}$ es diagonal, con $D_{\phi\phi}^{-1} = D_{\perp\perp}^{-1}$, el parámetro b se anula, por lo que P_τ se expresa en términos de la función I_0 , fácilmente evaluable mediante fórmulas aproximadas desarrolladas para la computación. De forma general, la serie de (5.21) no se resume en un único sumando, no siendo posible, además, establecer un criterio práctico que propicie el truncamiento de esta serie tras cierto número de términos.

Es obvio que la expresión de P_τ debe obtenerse directamente de la ecuación (5.20) mediante la generación de un operador auxiliar \mathbf{L}_{FP}^* aplicando el procedimiento establecido en la sección 2.2.2. Con este propósito conviene mantener explícita la dependencia en $1/v_\perp$ sobre la expresión del operador auxiliar, con el fin de no absorber en la representación $\delta = \delta(v_\perp - v'_\perp) \delta(v_\parallel - v'_\parallel)$ el comportamiento del propagador en el límite $v_\perp \rightarrow 0$. Esta opción derivará en una expresión de P_τ que se halle normalizada sobre la región en la que se define F en las variables de campo $\{v_\perp, v_\parallel\}$ no primadas, independientemente de los valores que tomen D_α y $D_{\alpha\beta}$ tasados en las variables v'_\perp y v'_\parallel . La conveniencia de esta opción fue ya discutida en el capítulo anterior. Así mismo, todas las derivadas sobre los coeficientes difusivos se supondrán contenidas en la propia expresión de la función δ de Dirac. En este sentido, un primer acercamiento al problema concede al operador auxiliar $\mathbf{L}_{FP}^* = \mathbf{L}_{FP1}^*$ la expresión

$$\begin{aligned} [1 + \tau \mathbf{L}_{FP}] \delta &= \delta + \tau \mathbf{L}_{FP1}^* \delta = \delta - \\ &- \tau \frac{\partial}{\partial v_\perp} \left[\frac{D'_{\phi\phi}}{v_\perp} + D'_\perp - D'_{\perp\parallel} \frac{\partial}{\partial v_\parallel} - D'_{\perp\perp} \frac{\partial}{\partial v_\perp} \right] \delta \\ &- \tau \frac{\partial}{\partial v_\parallel} \left[D'_\parallel - D'_{\perp\parallel} \frac{\partial}{\partial v_\perp} - D'_{\parallel\parallel} \frac{\partial}{\partial v_\parallel} \right] \delta \end{aligned}$$

donde el indicador ' denota los coeficientes evaluados sobre las coordenadas fuente $\{v'_\perp, v'_\parallel\}$. Ya que se ha decidido no incluir el factor $1/v_\perp$ dentro de la representación δ interesa ahora analizar el comportamiento de P_τ en el límite de $v_\perp \rightarrow 0$. Dado que P_τ ha de ser la solución formal de la ecuación

$$\frac{\partial P_\tau}{\partial \tau} = \mathbf{L}_{FP1}^* P_\tau ,$$

tratando todas las magnitudes primadas como parámetros constantes, el comportamiento asintótico de P_τ en el límite anterior se recoge en la ecuación

$$\frac{\partial P(v_\perp)}{\partial \tau} = -\frac{\partial}{\partial v_\perp} \left[\frac{D'_{\phi\phi}}{v_\perp} - \frac{\partial}{\partial v_\perp} D'_{\perp\perp} \right] P(v_\perp) \quad (5.22)$$

donde se ha supuesto fijo el valor de v_\parallel . Así pues, como orientación sobre la dependencia funcional en v_\perp de la probabilidad de transición a tiempos cortos, basta resolver la ecuación anterior con las condiciones de corriente nula en $v_\perp = 0$. En este caso, la solución a (5.22) se obtiene de forma inmediata mediante el recurso de la reducción a un problema de autovalores. El problema de Sturm-Liouville asociado presenta un espectro continuo de autovalores con

autofunciones dadas en términos de funciones de Bessel de primera especie y de orden ν , de forma análoga a la Ecuación del Calor en simetría cilíndrica, pero con $\nu \neq 0$; en concreto

$$P(v_{\perp}) = \frac{v_{\perp}}{2\tau\sqrt{D'_{\perp\perp}}} \left[\frac{v_{\perp}}{v'_{\perp}} \right]^{\nu} I_{\nu} \left[\frac{v_{\perp}v'_{\perp}}{2D'_{\perp\perp}\tau} \right] \exp \left[-\frac{v_{\perp}^2 + v_{\perp}'^2}{4D'_{\perp\perp}\tau} \right]$$

donde el orden ν de la función de Bessel de segunda especie es

$$\nu = \frac{1}{2} (D'_{\phi\phi}/D'_{\perp\perp} - 1)$$

dependiente de la relación entre $D'_{\phi\phi}$ y $D'_{\perp\perp}$. Es evidente que la situación mejora respecto a la obtenida por la serie infinita de (5.21) pero la dependencia en v' del índice ν incurre de nuevo en la imposibilidad práctica de evaluar en cada iteración las funciones I_{ν} , sin que ello suponga una dilación excesiva en el tiempo de computación. Sólo si $D_{\perp\perp} = D_{\phi\phi}$ el índice ν es independiente de todas las variables del problema ya que, en este caso $\nu = 0$.

El término convectivo espúreo $D_{\phi\phi}/v_{\perp}$ introducido por las condiciones de geometría, deriva en una expresión prácticamente intratable para la probabilidad de transición a tiempos cortos. Sin embargo, este inconveniente presenta su análogo formal en el problema estudiado anteriormente para condiciones de simetría esférica. En dicha simetría, el comportamiento de P_{τ} para $v \rightarrow 0$ se recoge en (5.22) si $D_{\phi\phi}$ se cambia por $2D_{\theta\theta}$, pero la redefinición del término convectivo $2D_{\theta\theta}/v + D_v$ para $v^2 f$ en la forma $2D_{v\theta}/v + A_v$ generó una dependencia en $I_{\frac{1}{2}}$ reducible a exponenciales simples. La situación para el problema en simetría cilíndrica es similar, siempre que puedan redefinirse las convecciones formales para la ecuación en F de tal forma que, en la ecuación asintótica (5.22) el coeficiente en $1/v_{\perp}$ coincida con $D_{\perp\perp}$. Esta opción es realmente factible, para ello basta recurrir al análisis cualitativo de los coeficientes D_{\perp} y D_{\parallel} cuando estos se expresan en función de la divergencia del tensor de difusión según (5.9) para dar

$$\begin{aligned} \frac{D_{\perp}}{2} &= \frac{D_{\perp\perp} - D_{\phi\phi}}{v_{\perp}} + \frac{\partial}{\partial v_{\perp}} (D_{\perp\perp} + D_{\parallel\parallel}) \\ \frac{D_{\parallel}}{2} &= \frac{D_{\perp\parallel}}{v_{\perp}} + \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} (D_{\perp\perp} + D_{\parallel\parallel}) \end{aligned}$$

lo que sugiere la redefinición de $D_{\phi\phi}/v_{\perp} + D_{\perp}$ y D_{\parallel} según

$$\frac{D_{\phi\phi}}{v_{\perp}} + D_{\perp} = \frac{D_{\perp\perp}}{v_{\perp}} + A_{\perp} \quad \text{y} \quad D_{\parallel} = \frac{D_{\perp\parallel}}{v_{\perp}} + A_{\parallel}, \quad (5.23)$$

del mismo modo que en el problema con simetría esférica se definió $2D_{\theta\theta}/v + D_v = 2D_{v\theta}/v + A_v$, en función de un nuevo término de deriva A_v cuyo comportamiento en v era similar al mostrado por la componente radial D_v del vector de convección \mathbf{D} .

Los nuevos coeficientes convectivos formales A_{\perp} y A_{\parallel} exhiben un comportamiento funcional similar al presentado por D_{\perp} y D_{\parallel} en la región $(0, \infty [\times] - \infty, \infty [$ asociada a las variables $(v_{\perp}, v_{\parallel})$; de hecho, las relaciones A_{\perp}/D_{\perp} y $A_{\parallel}/D_{\parallel}$ representan funciones prácticamente constantes. Esta propiedad puede verificarse sencillamente cuando cada uno de estos términos se reemplazan por los correspondientes para la solución maxwelliana de

equilibrio, dados en la sección precedente. Es evidente que la situación es ahora similar a la encontrada para la relación A_v/D_v en el problema totalmente isotrópico. Dado que $D_{\perp\parallel}/v_\perp$ se mantiene finito cuando v_\perp tiende a cero, la contribución a P_τ del término $1/v_\perp$ queda implícita únicamente en $D_{\perp\perp}/v_\perp$, por lo que (5.22) recoge un comportamiento asintótico para este límite en función sólo de I_0 , fácilmente evaluable mediante fórmulas de cuadratura con funciones polinómicas y exponenciales, desarrolla para la computación y sobradamente conocidas en la literatura [4] .

Los argumentos anteriores conducen a la definición de un nuevo operador auxiliar L_{FP}^* similar a L_{FP1}^* con las sustituciones indicadas en la relación

$$L_{FP}^* = L_{FP1}^*(D'_{\phi\phi} \equiv D'_{\perp\perp} | D'_\perp \equiv A'_\perp | D'_\parallel \equiv \frac{D'_{\perp\parallel}}{v_\perp} + A'_\parallel). \quad (5.24)$$

Este operador origina una nueva ecuación diferencial para P_τ , cuya solución es la expresión de la probabilidad de transición cuando las funciones primadas se tratan como parámetros y τ se identifica con el tiempo de evolución para la ecuación de Fokker-Planck auxiliar. Con el fin de eliminar los términos en derivadas cruzadas se ha procedido a un cambio lineal de variables en la forma

$$r = v_\perp \quad y \quad z = v_\parallel - \frac{D'_{\perp\parallel}}{D'_{\perp\perp}} v_\perp$$

para el cual, el jacobiano $||J||$ de la transformación coincide con la unidad. La ecuación diferencial que ha de resolverse presenta ahora la forma

$$\frac{\partial P}{\partial \tau} = -\frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{D_{rr}}{r} + A_r - D_{rr} \frac{\partial}{\partial r} \right] P - \frac{\partial}{\partial z} \left[A_z - D_{zz} \frac{\partial}{\partial z} \right] P$$

con $D_{rr} = D'_{\perp\perp}$, $D_{zz} = \frac{D'_\parallel}{D'_{\perp\perp}}$, $A_r = A'_\perp$ y $A_z = A'_\parallel - \frac{D'_{\perp\parallel}}{D'_{\perp\perp}} A'_\perp$

donde D'_\parallel representa el determinante $D'_\parallel = D'_{\perp\perp} D'_{\parallel\parallel} - D'^2_{\perp\parallel}$. Es obvio que la nueva ecuación en $\{r, z\}$ sin términos en derivadas mixtas es fácilmente identificable con una ecuación de Fokker-Planck caracterizada por un tensor de difusión diagonal, que en coordenadas cartesianas presenta las propiedades $D_{xx} = D_{yy} = D_{rr} \neq 0$ y $D_{zz} \neq 0$, lo que sugiere la posibilidad de atribuir como solución a la ecuación anterior la función resultante de integrar en las variables angulares la expresión de la distribución gaussiana (2.13) cuando se procede a un cambio de variables a coordenadas cilíndricas en r y r' . La forma diagonal del tensor D_{RR} simplifica las operaciones contenidas en dicha integral y reduce la función $I(a, b)$ dada por (5.21) a un único sumando que cuenta sólo con I_0 . Esta argumentación dispensa una expresión apropiada de P_τ , sin recurrir a la integración directa de la ecuación diferencial auxiliar, cuya resolución es tediosa.

Alternativamente, puede optarse por factorizar los nuevos coeficientes convectivos introduciendo dos nuevas funciones $a(v, t)$ y $b(v, t)$ si se continúa la comparación paralela con el problema esférico. Así, a y b serían funciones equiparables a $\alpha(v, t) = -A_v/vD_{vv}$ en (4.10), cuyas definiciones se hallan perfectamente justificadas sin más que observar la relación entre las componentes del vector de deriva y el tensor de difusión, una vez alcanzado el equilibrio

(5.19). Eligiendo convenientemente los parámetros a y b , que se evaluarán sobre (v'_\perp, v'_\parallel) , es posible reducir la ecuación diferencial auxiliar a

$$\dot{P} = -D_{rr} \frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{1}{r} - \alpha r - \frac{\partial}{\partial r} \right] P - D_{zz} \frac{\partial}{\partial z} \left[-\beta z - \frac{\partial}{\partial z} \right] P \quad (5.25)$$

fácilmente resoluble mediante separación de variables y la subsecuente reducción a un problema de autovalores. Es sencillo verificar que (5.25) representa la ecuación de evolución para la probabilidad de transición P de un proceso de Ornstein-Uhlenbeck tridimensional con tensor de difusión diagonal ($D_{xx} = D_{yy}$) en coordenadas cilíndricas y solución estacionaria $N \exp(-\alpha(x^2 + y^2)/2 - \beta z^2/2)$. Nuevamente, la analogía con el problema en simetría esférica es claro. Las funciones α y β se evalúan en v' , determinándose a partir de

$$\begin{cases} \alpha(v_\perp, v_\parallel) = -A_r(v_\perp, v_\parallel) [r D_{rr}(v_\perp, v_\parallel)]^{-1} \\ \beta(v_\perp, v_\parallel) = -A_z(v_\perp, v_\parallel) [z D_{zz}(v_\perp, v_\parallel)]^{-1}. \end{cases}$$

Cuando $P(r, z|\tau)$ en (5.25) se factoriza en la forma $P = \sum_{n,m} \exp(-\lambda_{n,m}\tau) \varphi_n(r) \psi_m(z)$ las autofunciones φ_n y ψ_m se dan en función de los Polinomios Generalizados de Laguerre de orden 0 L_n^0 y de los polinomios de Hermite H_m respectivamente. Las expresiones para este conjunto de funciones ortogonales son suficientemente conocidas (véase, por ejemplo, [5] y [6]) por lo que no se reescriben aquí. Sólo se consigna a continuación la expresión de P identificable con P_τ y adecuada para el avance temporal de la ecuación integro-diferencial de Fokker-Planck

$$P_\tau(v_\perp, v_\parallel; v'_\perp, v'_\parallel | t) = \frac{\alpha r}{1-u^2} \exp \left[\frac{-\alpha}{2} \frac{r^2 + r'^2 u^2}{(1-u^2)} \right] I_0 \left[\alpha \frac{r r' u}{1-u^2} \right] \times \quad (5.26)$$

$$\sqrt{\frac{\beta}{2\pi(1-v^2)}} \exp \left[-\frac{\beta}{2} \frac{(z - z' v)^2}{(1-v^2)} \right]; \quad u = e^{-\alpha\tau D_{rr}}, \quad v = e^{-\beta\tau D_{zz}}.$$

La probabilidad anterior es válida para avanzar en el tiempo la distribución F , con independencia del signo de las funciones α y β , ya que tanto $D_{rr} = D_{\perp\perp}$ como $D_{zz} = D_{\parallel\parallel}$ son positivos para cualesquiera valores de v_\perp y v_\parallel . Sin embargo, α se conserva siempre mayor que cero, al igual que β y ello favorece la elección de un paso temporal τ relativamente grande comparado con el tiempo de relajación estimado del sistema. Puede verificarse que si se procede al límite $\tau \rightarrow \infty$ y todos los coeficientes difusivos se sustituyen por sus valores en el estado de equilibrio, la integración sobre las variables primadas con cualquier condición inicial $F_0(v'_\perp, v'_\parallel)$ conduce a la solución estacionaria del problema (5.10) pues los parámetros α y β son prácticamente constantes. Así pues, en esta probabilidad de transición puede recogerse una amplia gama de valores en τ que incurrirán en una descripción aceptable, al menos, para el estado de equilibrio.

La descripción del régimen transitorio precisa de un valor del paso temporal reducido si se compara con el tiempo de relajación o termalización del sistema. En las unidades normalizadas los coeficientes convectivos vienen representados por funciones que se hallan, en valor absoluto, acotadas superior e inferiormente. En consecuencia, los argumentos de

las exponenciales en u y v de (5.26) pueden tratarse como infinitésimos de orden τ , lo que justifica las sustituciones

$$\begin{aligned} r' \exp(-\alpha D_{rr} \tau) &\simeq r' + \tau A_r, \\ z' \exp(-\beta D_{zz} \tau) &\simeq z' + \tau A_z \end{aligned}$$

aconsejables para la evaluación numérica de la matriz de evolución del esquema integral. La aproximación de las exponenciales anteriores y la devolución de todos los cambios de variables, prestan a P_τ la expresión definitiva

$$\begin{aligned} P_\tau(\mathbf{v}, \mathbf{v}'|t) &= P_\tau(v_\perp, v_\parallel; v'_\perp, v'_\parallel | t) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{4\pi\tau D'_i}} \exp \left[-\frac{D'_{\parallel\parallel} U^2 - 2D'_{\perp\parallel} UV + D'_{\perp\perp} V^2}{4\tau D'_i} \right] \\ &\quad \times \frac{v_\perp}{2\tau\sqrt{D'_{\perp\perp}}} i_0 \left[\frac{2v_\perp(v'_\perp + A'_\perp\tau)}{4D'_{\perp\perp}\tau} \right] \end{aligned} \quad (5.27)$$

donde $U = v_\perp - v'_\perp - A'_\perp\tau$ y $V = v_\parallel - v'_\parallel - A'_\parallel\tau$, que coincide con la obtenida por integración sobre las variables angulares de la distribución gaussiana tridimensional asociada al operador L^*_{FP} . Ambos procedimientos (integración sobre la distribución gaussiana y reducción a un problema intermedio tipo Ornstein-Uhlenbeck) derivan en la misma expresión para la probabilidad de transición a tiempos cortos. Es evidente que P_τ es válida si realmente representa una probabilidad condicional normalizada a la unidad en $(0, \infty) \times (-\infty, \infty)$, para ello es imprescindible que la forma cuadrática contenida en el argumento de la exponencial sea definida positiva. Este hecho se da siempre, ya que el tensor \mathcal{D} representa una matriz definida con determinante $D_{\phi\phi} D_i$ positivo y distinto de cero para cualquier distribución F . La función i_0 se ha definido en la forma

$$i_0(q) = I_0(q) \exp(-q)$$

para que el primer factor de (5.27) sea sencillamente identificable con una distribución gaussiana, a la que se reduce P_τ si el argumento de I_0 es suficientemente grande.

Al igual que en los problemas simples unidimensionales analizados en el segundo capítulo, la expresión general para la probabilidad de transición a tiempos cortos de la ecuación de Fokker-Planck (2.13) sigue siendo válida para valores de la variable radial alejados del origen. A pesar de que el cálculo de la función de Bessel I_0 no supone una demora sustancial en el tiempo de computación, la función P_τ anterior puede sustituirse por la distribución gaussiana usual si $v_\perp \gg 0$, puesto que esta última no se halla normalizada a la unidad si v_\perp es cercana a cero, para ningún valor finito de τ .

Es sencillo verificar que P_τ en cualquiera de las formas anteriores se halla normalizada a la unidad y que, en el límite $\tau \rightarrow 0$, reproduce correctamente los momentos A_β y $D_{\alpha\beta}$. La adecuación última a las condiciones del problema en el avance de F se llevará a cabo en secciones posteriores mediante el concurso de la función de autocorrelación Ψ apropiada para el mantenimiento de la energía del sistema físico.

En ocasiones, interesa únicamente la descripción del estado de equilibrio, que puede no ser maxwelliano o representar una perturbación del mismo. Con este propósito los esquemas numéricos en diferencias proponen modelos implícitos tipo Crank-Nicholson para los cuales el equilibrio puede alcanzarse en pocos pasos temporales, dada la estabilidad del modelo. El inconveniente de las derivadas mixtas para la inversión matricial hace que tengan que suponerse condiciones de isotropía total para avanzar la ecuación en simetría esférica, distorsionando la realidad física del problema (véase [2] por ejemplo). En cambio, el procedimiento integral presta una excelente aproximación para este objetivo, cuando se usa como propagador la expresión (5.26) utilizando para los coeficientes difusivos los correspondientes a los del estado de equilibrio maxwelliano. En este caso, sin la presencia de calentamientos ni de fuerzas exteriores la solución estacionaria de equilibrio coincide siempre con la maxwelliana (5.10).

Así pues, según sean las necesidades del problema en estudio se utilizará una u otra expresión para la probabilidad de transición. En el análisis del régimen transitorio, con τ suficientemente pequeño, todas las opciones son equivalentes, siendo preferible (5.27) para reducir el tiempo de computación. En cualquier caso, la solución numérica de equilibrio es siempre la misma, con independencia de la condición inicial F_0 . Estos y otros resultados se presentan en secciones posteriores, una vez establecida la discretización apropiada en las variables.

5.4 Esquema numérico.

La ecuación integro-diferencial satisfecha por la función $F(v_{\perp}, v_{\parallel}; t)$ presenta la apariencia formal de una ecuación de naturaleza estocástica del tipo Fokker-Planck. Los argumentos esgrimidos a lo largo de la exposición apoyan la tesis de que la distribución f puede ser implementada en el tiempo según el procedimiento numérico integral, a través de la ecuación integral de evolución para la nueva función F . El propagador a tiempos cortos P_{τ} obtenido en la sección anterior se presta de forma eficiente para el avance de cualquier condición inicial $F_0 = 2\pi v_{\perp} f_0$ mediante la resolución numérica de las integrales involucradas en el proceso. Es interesante señalar que P_{τ} es independiente de las variables angulares $\{\phi, \phi'\}$ por lo que la integración sobre las variables primadas pueden llevarse a cabo de forma equivalente al procedimiento de integración sobre variables cartesianas ordinarias. Este hecho simplifica notablemente los cálculos, pues la ausencia en el propagador a tiempos cortos de coordenadas angulares favorece el diseño de una retícula espacial uniforme sobre la que se llevan a cabo las integrales numéricas.

El problema de la definición del propagador P_{τ} en coordenadas curvilíneas, así como la integración sobre las mismas ha suscitado en la literatura sobre el tema una gran controversia, en particular en lo relativo a la obtención de la probabilidad condicional $P(q, t|q', 0)$ por el procedimiento del 'recorrido integral' (*Path-Integral*) con variables no cartesianas [7]. Algunos autores defienden la tesis de la integrabilidad sobre cualquier tipo de coordenadas siguiendo los mismos procedimientos establecidos para coordenadas cartesianas, renormalizando la expresión del propagador (2.13), pues en el límite de $\tau \rightarrow 0$ éste representa la condición inicial $\delta(q - q')$. Numéricamente se ha verificado la inoperatividad de este procedimiento de renormalización mediante los ejemplos simples estudiados en el segundo capítulo

(véase la figura 3.2). Tal modo de operación sería aplicable, en último extremo, si pudieran evaluarse de forma analítica las N integrales recurrentes de (1.17) para proceder al límite $\tau \rightarrow 0$ con $N\tau = t$.

La confianza en el método de obtención de P_τ dado en la sección 2.2.2, se ha visto notablemente apoyada por la experiencia en todos los procesos estudiados —lineales o no— descritos por ecuaciones del tipo Fokker-Planck. Para algunos de estos problemas, en concreto, los procesos de Ornstein-Uhlenbeck dependientes del tiempo, la integración sobre la expresión de un propagador alternativo distinto del habitual (2.13) se ha realizado de forma analítica, conduciendo a la expresión correcta del propagador cuando τ tiende a cero y el número n de integraciones tiende a infinito, manteniendo $n\tau = t$ constante. En este sentido se ha procedido a la resolución de un problema de Ornstein-Uhlenbeck tridimensional con solución estacionaria gaussiana y tensor de difusión diagonal con elementos iguales. La aplicación de la probabilidad de transición del tipo (5.27) con independencia en la variable axial $z = v_\parallel$ y en la que I_0 se sustituye por $I_{1/2}$, permite calcular de forma analítica las integrales para la implementación de la condición inicial $\delta(r - r_0)$ en la variable radial. El problema es equivalente al abordado en la sección 3.2.2, por ello no se consignan aquí las expresiones matemáticas correspondientes. El resultado, para la convergencia uniforme en τ y N reseñada anteriormente, es la solución analítica para la distribución obtenida por la resolución directa de la ecuación diferencial original. Es plausible, por tanto, que la expresión del propagador inferida en la sección anterior resulte eficiente para el avance temporal de f_0 mediante la resolución numérica de las integrales implicadas en la ecuación integral de evolución (2.9).

No obstante, con el fin de calibrar la efectividad del propagador (5.27), se ha resuelto de forma paralela un problema similar al abordado en este capítulo, con igual solución estacionaria, de carácter no lineal y con las mismas cantidades conservadas, para el que se conoce analíticamente la evolución en el tiempo de la diferencia $T_\perp - T_\parallel$. Este análisis simultáneo permitirá establecer la operatividad del propagador en cuanto a la evolución de los momentos de la distribución y motivar la confianza en la convergencia hacia la solución de equilibrio.

Siguiendo las pautas de operación fundamentadas en los capítulos precedentes, en virtud de lo expuesto en los párrafos anteriores sobre las condiciones de integrabilidad en las coordenadas cilíndricas, se ha decidido utilizar una red discreta uniforme caracterizada por una celda unidad de base $\Delta v_\perp \times \Delta v_\parallel$. La distribución F se considera evaluada sobre el punto central de cada celdilla, lo que equivale a la elección de $N \times M$ puntos del plano de coordenadas $(v_{\perp i}, v_{\parallel j})$ según

$$\begin{cases} v_{\perp i} = (i - 1/2) \Delta v_\perp, & \Delta v_\perp = v_\perp^{max}/N \\ v_{\parallel j} = v_\parallel^{min} + (j - 1/2) \Delta v_\parallel, & \Delta v_\parallel = (v_\parallel^{max} - v_\parallel^{min})/M \end{cases} \quad (5.28)$$

donde v^{max} y v^{min} representan los límites máximo y mínimo de cada eje coordenado. Los índices i y j toman los valores $i = 1, 2, \dots, N$ y $j = 1, 2, \dots, M$ respectivamente. Por lo general, considerando las condiciones de simetría del problema, conviene operar con una red discreta en la que $v_\parallel^{min} = -v_\parallel^{max} = -v_\perp^{max}$ y $M = 2N$, con lo que $\Delta v_\perp = \Delta v_\parallel$. La elección de una retícula formada por celdas de base cuadrada no es estrictamente necesaria, la uniformidad

de la red aludida anteriormente se refiere sólo a la elección de celdas de igual superficie sobre el plano finito en el que se resuelve el problema. Dado que F se considera evaluada sobre el punto central de cada celda, la malla anterior no contiene a las rectas frontera del espacio bidimensional real $(0, \infty) \times (-\infty, \infty)$ simbolizado por la región finita $(\Delta v_{\perp}/2, v_{\perp}^{max} - \Delta v_{\perp}/2) \times (v_{\parallel}^{min} + \Delta v_{\parallel}/2, v_{\parallel}^{max} - \Delta v_{\parallel}/2)$. Las condiciones de corriente de probabilidad nula acogidas en la representación del propagador a tiempos cortos para la función F , sobre los límites del plano real, se traducen en la anulación de la corriente de probabilidad para el propagador real de f en las superficies frontera del espacio de velocidades. Físicamente estas condiciones reproducen la anulación del flujo de partículas a través de dichas superficies, requisito esencial para la conservación de la densidad $n(r, t)$ en el tiempo. Dado que P_{τ} es proporcional a v_{\perp} y éste decae exponencialmente con el cuadrado del módulo de la velocidad, los valores v^{min} y v^{max} se elegirán de tal modo que, tanto F como P_{τ} puedan suponerse numéricamente nulos sobre las rectas del plano que limitan la retícula finita. Por lo general basta tomar $v^{max} \simeq 5$ y $v_{\perp}^{min} = 0$ para que estas condiciones sean satisfechas.

La función F se representa así, en términos de la función $\xi(a, x, b)$ definida en (2.30), como

$$F = \sum_{ij} \xi(v_{\perp i} - \frac{\Delta v_{\perp}}{2}, v_{\perp}, v_{\perp i} + \frac{\Delta v_{\perp}}{2}) \cdot \xi(v_{\parallel j} - \frac{\Delta v_{\parallel}}{2}, v_{\parallel}, v_{\parallel j} + \frac{\Delta v_{\parallel}}{2}) F_{ij}^n \Delta v_{\perp} \Delta v_{\parallel}$$

donde F_{ij}^n denota, como es habitual, el valor de la función sobre el punto central de cada celda en el instante $t = n\tau$ de la evolución. Siguiendo la evolución de cada F_{ij}^n a lo largo del tiempo, la solución numérica F^n presenta en cada iteración la forma anterior. Si a la distribución real f se le atribuye norma unidad sobre el espacio tridimensional de velocidades, F se encontrará también normalizada a la unidad en el espacio geométrico bidimensional auxiliar en el que se halla definida, lo que equivale a afirmar que

$$\sum_{(i,j)=(1,1)}^{(N,M)} F_{ij}^n \Delta v_{\perp} \Delta v_{\parallel} = 1$$

o, de forma equivalente,

$$\sum_{(i,j)=(1,1)}^{(N,M)} 2\pi f_{ij}^n v_{\perp i} \Delta v_{\perp} \Delta v_{\parallel} = 1$$

así, $F_{ij}^n \Delta v_{\perp} \Delta v_{\parallel} = 2\pi f_{ij}^n \Delta v_{\perp} \Delta v_{\parallel}$ representa la fracción de partículas de sistema cuya componente radial -en la dirección perpendicular al vector campo- de la velocidad se encuentra entre $v_{\perp i} - \Delta v_{\perp}/2$ y $v_{\perp i} + \Delta v_{\perp}/2$, estando la componente axial simultáneamente comprendida entre $v_{\parallel j} - \Delta v_{\parallel}/2$ y $v_{\parallel j} + \Delta v_{\parallel}/2$. De igual modo se definen las temperaturas transversales T_{\perp} y T_{\parallel} en la n -ésima iteración como

$$T_{\perp}^n = \frac{1}{2} \sum_{ij} v_{\perp i}^2 F_{ij}^n \Delta v_{\perp} \Delta v_{\parallel}$$

$$T_{\parallel}^n = \sum_{ij} v_{\parallel j}^2 F_{ij}^n \Delta v_{\perp} \Delta v_{\parallel}$$

siendo la energía cinética media E del sistema $E^n = \frac{3}{2}T^n$ donde $T^n = \frac{2}{3}T_{\perp}^n + \frac{1}{3}T_{\parallel}^n$ define la temperatura con relación al momento inicial $\langle v_0 \rangle$, supuesto nulo, asociado a la distribución de partículas f_0 en $t = 0$. Las características del operador colisional de Landau prestan a la representación del sistema las características conservativas aludidas en la primera sección. La magnitud E^n o su equivalente T^n representa una segunda cantidad conservada del problema (la primera cantidad conservada se refiere a la norma unidad de F) a la que hay que añadir la conservación de la componente paralela $\langle v_{\parallel} \rangle$ del momento medio del sistema, cuya constancia resulta obviamente satisfecha,¹ tanto en el caso discreto como en el continuo, dadas las condiciones de simetría axial implícitas en la formulación del problema. En definitiva, el esquema numérico ha de ser consecuente con la preservación del valor inicial de la energía cinética media del sistema, ya que la conservación de la norma de F resulta trivial si los elementos de la matriz de evolución Q se definen correctamente.

Con relación al cálculo de las integrales angulares $I(n)$ como funciones del parámetro m cabe destacar que para $m = 1$ las tres integrales del tipo elíptico que motivan la definición de las funciones auxiliares $\{d\}$ independientes del tiempo son singulares. El parámetro m coincide con la unidad si $v = v'$ lo que equivale a las identidades a $v_{\perp i} = v_{\perp i'}$ y $v_{\parallel j} = v_{\parallel j'}$, sin embargo, la integral sobre las variables primadas de los núcleos $\{d\}$ para cada coeficiente difusivo es siempre convergente. Por esta razón conviene evaluar las integrales elípticas para K valores de m con $m(1) = 0$ y $m(K) = 1 - \epsilon$ siendo ϵ un parámetro positivo tan próximo a cero como se desee, siempre que $m(K)$ no dé lugar a infinitos de carácter numérico. Por lo general, es suficiente elegir $K = 150$ para cualesquiera valores razonables de los parámetros de red. Las integrales angulares dan lugar así a funciones auxiliares independientes del tiempo obtenidas por simple interpolación lineal para los valores de m , generados por la tríada de índices i, i' y $l = j - j'$. La resolución numérica de las integrales en ϕ' para cada uno de los K valores de m se ha realizado sobre una red discreta uniforme en la variable angular que contiene a los puntos frontera $\phi = 0$ y $\phi = \pi$, por lo que es conveniente recurrir a fórmulas de cuadratura en la que estos puntos se incluyan. En particular se ha utilizado el algoritmo de Simpson, eligiendo el número de puntos de la red en ϕ que permitan aproximar la integral hasta cierto orden para $m = 0$, comparado, como valoración orientativa, con su valor exacto π . Se han ensayado otros procedimientos para la tasación de las integrales angulares, tales como la reducción a integrales elípticas completas de primera y segunda especie, para utilizar así el recurso del cálculo mediante fórmulas de cuadratura presentadas en los manuales para la computación, o el desarrollo en series de potencias de m . Estos procesos alternativos consumen más tiempo de computación y complican el problema en exceso. La resolución numérica de las integrales angulares se ha presentado como la alternativa más eficiente al efecto, ya que puede refinarse tanto como se desee la red en ϕ pues su cómputo sólo es necesario antes de la implementación de F . Por otra parte, el desarrollo en series de armónicos esféricos de Legendre se ha contemplado inoperante, por la necesidad de truncar la serie en cierto orden, introduciendo así errores cuya propagación afectaría de forma considerable al mantenimiento de las cantidades conservadas del problema.

Obtenido el conjunto de funciones $\{d\}$ antes de comenzar el proceso iterativo, la implementación de F a partir de F^n se lleva a cabo tras el cálculo de los coeficientes D_{α}^n y $D_{\alpha\beta}^n$ con F^n y d_{α} $d_{\alpha\beta}$ mediante integración simple por rectángulos sobre cada eje coorde-

¹ en ausencia de fuerzas exteriores

nado. Los coeficientes difusivos permiten la tasación de los elementos $Q_{I,I'}^n$, de la matriz de evolución Q , donde los pares (i, j) e (i', j') se han notado simbólicamente por los índices latinos I e I' respectivamente. Con el fin de preservar exactamente la norma unidad de F_0 ha de procederse a la renormalización numérica de la probabilidad de transición a tiempos cortos. Para ello, antes de aplicar la ecuación integral de evolución (2.9) conviene evaluar las cantidades

$$N_r(i', j') = N_r(I') = \sum_{ij} P_r(v, v' | t_n) \Delta v_{\perp} \Delta v_{\parallel} \quad (5.29)$$

que difieren de la unidad en las proximidades de $v_{\perp} = v_{\perp}^{max}$ y $v_{\parallel} = \pm v_{\parallel}^{max}$ como consecuencia de limitar la red a una región finita del plano. Así mismo, el conocimiento de $N_r(I')$ orienta sobre la fidelidad de la aproximación introducida por la discretización espacial. Cada norma N_r se aproxima notablemente a la unidad para puntos interiores de la retícula, incluso con valores de los pasos Δv_{\perp} y Δv_{\parallel} relativamente grandes —del orden de $\Delta v \simeq 0, 2$ — excepto en las fronteras de la malla. No obstante, el valor de $Q(I, I')^n$ y de $F^n(I)$ sobre las fronteras se considera suficientemente reducido como para anular numéricamente la contribución de los puntos exteriores, siempre que v_{\perp}^{max} y v_{\parallel}^{max} se elijan apropiadamente.

Los valores de las normas $N_r(I')$ pueden guardarse en memoria al ser funciones sólo de dos índices. Sin embargo, $Q_{I,I'}$ depende de cuatro índices, su archivo en memoria puede resultar improcedente según el computador utilizado. Es aconsejable recalcular antes de implementar F^n los elementos $Q_{I,I'}^n = P_r(I, I' | t_n) \Delta v_{\perp} \Delta v_{\parallel}$ que pasarán a ser Q^n/N_r , para aplicar definitivamente

$$F_I^{n+1} = \sum_{I'=(1,1)}^{(N,M)} F_{I'}^n Q_{I,I'}^n \quad (5.30)$$

que proporciona los valores del vector $\{F^n\}$ de dimensión $N \times M$. De la relación anterior se desprende de forma inmediata que $\sum_{I'} F_I^{n+1} = \sum_{I'} F_{I'}^n$ que asegura el mantenimiento de la norma unidad de $f = F / (2\pi v_{\perp})$. La división de F^n por v_{\perp} no da lugar a singularidades por muy refinada que sea la red, pues P_r es proporcional a v_{\perp} , por lo que (5.30) es válida también para la relación entre f^{n+1} y f^n si cada $Q_{I,I'}^n$ se redefine como Q^n/v_{\perp} .

Debe notarse que en (5.30) se ha procedido a la simple integración por rectángulos mediante la generalización bidimensional de la Regla Extendida del Punto Medio. Ello supone la asunción de la condición impuesta sobre el paso temporal τ en (3.4) particularizada al problema bidimensional según

$$\tau \geq \frac{\left[\frac{\Delta v_{\perp} \Delta v_{\parallel}}{2D_{\perp}^{min} \sqrt{4\pi D_t^{min}}} \right]^{\frac{2}{3}}}{1}$$

que orienta sobre el valor de τ aconsejable. Sin embargo, la mayoración no es estricta porque el factor v_{\perp} i 0 de P_r es reducido en las proximidades de $v_{\perp} = 0$, lo que realmente permite elegir τ menores que los caracterizados por la desigualdad anterior.

La doble computación de los elementos de la matriz de evolución —para calcular las normas $N_r(I')$ y para la redefinición de $Q_{I,I'}^n$ — consume menos tiempo que la evaluación de los coeficientes difusivos asociados a F^n en cada iteración. No obstante, con el fin de reducir el tiempo de computación, puede procederse a la estimación de los valores de $Q_{I,I'}^n$ que

realmente son diferentes de cero, opción que incluye la posibilidad de poder dimensionar los componentes de la matriz de evolución. Para ello basta analizar la expresión de la probabilidad de transición y considerar las elipses de equiprobabilidad, o valores de $(v_{\perp}, v_{\parallel})$ para los cuales la probabilidad de que este vector caiga en un determinado entorno del vector $(v'_{\perp} - A'_{\perp} \tau, v'_{\parallel} - A'_{\parallel} \tau)$ que define la media de la distribución, se halle tan próximo a la unidad como se desee. Dado que la función $v_{\perp} \dot{v}_{\parallel}$ se encuentra acotada superiormente por la unidad, el estudio puede consumarse atendiendo al factor de P_{τ} identificable con la distribución gaussiana habitual. La distribución normal no degenerada $1/(2\pi\sqrt{\det(C)}) \exp[-1/2c_{kl}(x_k - m_k)(x_l - m_l)]$ mantiene constante su valor en las elipses de igual probabilidad

$$\frac{1}{2} c_{kl} (x_k - m_k) (x_l - m_l) = \mu^2,$$

siendo $\mathcal{P} = 1 - \exp(-\mu^2)$ la probabilidad de que el vector r caiga en el interior de tal elipse. La trasposición de este problema elemental para el cálculo de probabilidades a la distribución representada por el propagador a tiempos cortos, respecto al factor que en el mismo se identifica como una distribución normal, conduce a la estimación de los valores máximos (i_M, j_M) de los índices (i', j') , con cada par (i, j) fijo, para los cuales P_{τ} resulta realmente efectiva. Con la simplificación añadida $D'_{\perp\parallel} = 0$ y la extensión de la elipse de equiprobabilidad a una circunferencia de radio igual al eje mayor de aquélla, se tiene

$$i_M = \mathbb{E} \left[\frac{\sqrt{\tau D_{\perp\perp}^{max} \mu^2}}{-\Delta v_{\perp}} + \frac{A_{\perp}^{max} \tau}{-\Delta v_{\perp}} \right]$$

$$j_M = \mathbb{E} \left[\frac{\sqrt{\tau D_{\parallel\parallel}^{max} \mu^2}}{\Delta v_{\parallel}} + \frac{A_{\parallel}^{max} \tau}{-\Delta v_{\parallel}} \right]$$

donde $\mathbb{E}[z]$ denota la función *parte entera de* z . Los únicos elementos de la matriz de evolución necesarios para (5.30) son aquellos para los cuales se satisfacen las relaciones

$$|i - i'| \leq \max\{i_M, j_m\} \quad \text{y} \quad |j - j'| \leq \max\{i_M, j_m\} = K_M.$$

En particular, para $\Delta v_{\perp} = \Delta v_{\parallel} = 0, 1$, $\tau = 0, 5$ y $\mu^2 = 16$ sobre una red 50×100 i_m y j_m son del orden de 4 unidades, lo que equivale a calcular para cada par (i, j) fijo sólo 81 elementos como máximo – para puntos alejados de las rectas frontera – en lugar de los 500 elementos necesarios si el cálculo se extendiera a toda la red. En resumen, para cada eje coordinado el proceso difusivo-convectivo se extiende únicamente a $2K_M + 1$ puntos (entre 5 y 9, de forma general), resultando efectivo dicho proceso sobre en el plano sobre un círculo de radio $(2K_M + 1) \sqrt{\Delta v_{\perp} \Delta v_{\parallel}}$ en torno a cada punto $(v_{\perp i}, v_{\parallel j})$. Los $(N \times M)^2$ elementos de \mathcal{Q} quedan reducidos a $(2K_M + 1)^2(N \times M)$.

Por otra parte, dada la mayoración establecida para la determinación de los índices K_M , la integración por rectángulos del esquema de avance (5.30) reduce de forma ostensible el número de sumas sobre los índices primados, hecho que contribuye a limitar el tiempo de computación en varios órdenes de magnitud respecto a la situación primitiva. El tiempo invertido en cada iteración se aproxima al requerido para el avance de F' mediante un esquema explícito en diferencias.

Una segunda simplificación del problema puede efectuarse eliminando el número de cálculos introducidos por la tasación del propagador a tiempos cortos, que supone el cómputo de exponenciales y $N^2 \times M$ funciones de Bessel I_0 . Con este fin, puede calcularse P_τ en unidades normalizadas al inicio del programa, para proceder posteriormente en cada paso temporal a la interpolación numérica de valores archivados en memoria, a partir de los cuales se obtendrá cada valor de P_τ . En concreto, las definiciones

$$r = \frac{1}{\sqrt{4D'_{\perp\perp}\tau}} v_{\perp}, \quad \rho = \frac{1}{\sqrt{4D'_{\perp\perp}\tau}} (v'_{\perp} + \tau A'_{\perp})$$
(5.31)

$$z = \sqrt{\frac{D'_{\perp\perp}}{4D'_i\tau}} [v_{\parallel} - v'_{\parallel} - \tau A'_{\parallel} - \frac{D'_{\perp\parallel}}{D'_{\perp\perp}} (v_{\perp} - v'_{\perp} - \tau A'_{\perp})]$$

expresan P_τ en la forma

$$P_\tau(v, v'|t) = \frac{1}{4\tau\sqrt{D'_i}} P(r, \rho, z)$$

donde $P(r, \rho, z)$ es una función que puede dimensionarse en términos de tres índices antes del proceso iterativo, si en las variables (r, ρ, z) se recoge el espectro barrido por las mismas para todos los parámetros del problema. La función $P(r, \rho, z)$ se ha definido como

$$P(r, \rho, z) = \frac{2r}{\sqrt{\pi}} e^{-[r^2 + \rho^2 + z^2]} I_0(2r\rho) = \frac{2r}{\sqrt{\pi}} e^{-[(r-\rho)^2 + z^2]} i_0(2r\rho)$$

que se halla normalizada a la unidad sobre la región $(0, \infty) \times (-\infty, \infty)$ si $0 \leq r < \infty$ y $-\infty < z < \infty$ para cualquier valor real de ρ . La tabulación de $P(r, \rho, z)$ favorece la identificación de las nuevas variables en cada paso para la interpolación lineal, o identificación con los índices establecidos para obtener P_τ sin recalcular las funciones involucradas en su expresión general. Este procedimiento es aconsejable si se refina en exceso la red y se aumenta el número n de iteraciones. Por lo general, la simplificación introducida en el párrafo anterior para limitar el número de sumas en las integrales numéricas es suficiente para reducir cálculos, siendo (5.31) útil si se desea no recalcular en cada paso los coeficientes difusivos, ya que la expresión alternativa cedida por $P(r, \rho, z)$ para evaluar P_τ puede archivar en memoria como función única de tres índices, en lugar de los cuatro índices $\{i, j, i', j'\}$. Este modo de actuación resulta útil si todos los D_α y $D_{\alpha\beta}$ se sustituyen por los correspondientes a la situación de equilibrio maxwelliano según las relaciones (5.19) y anteriores, caso en que P_τ no tiene que evaluarse en cada iteración.

5.4.1 Cantidades conservadas. Autocorrelación numérica.

Se han descrito de forma exhaustiva los procedimientos para optimizar la operatividad del esquema numérico, reduciendo la cantidad de integraciones y simplificando el cálculo de los elementos $Q_{j,l}^n$. Hasta aquí, sólo se ha preservado la norma unidad de f_0 como única cantidad conservada del problema. No obstante, la ecuación cinética (5.1) supone la constancia de la

energía cinética media del sistema para un plasma de un solo componente. De la definición del operador auxiliar L_{FP}^* , en (5.24), se desprende que los momentos $\overline{v_{\perp}^2}$ y $\overline{v_{\parallel}^2}$ asociados a probabilidad P_{τ} (definidos como $\int P_{\tau} v_{\alpha}^2 dv_{\perp} dv_{\parallel}$) verifican las relaciones

$$\frac{\overline{v_{\perp}^2}(t+\tau) - \overline{v_{\perp}^2}}{\tau} = 2[D'_{\perp\perp} + v'_{\perp} \left(\frac{D'_{\perp\perp}}{v'_{\perp}} + A'_{\perp} \right)] + O_{\perp}(\tau|v')$$

$$\frac{\overline{v_{\parallel}^2}(t+\tau) - \overline{v_{\parallel}^2}}{\tau} = 2[D'_{\parallel\parallel} + v'_{\parallel} \left(\frac{D'_{\perp\parallel}}{v'_{\parallel}} + A'_{\parallel} \right)] + O_{\parallel}(\tau|v')$$

en consecuencia, multiplicando ambos miembros de las identidades anteriores por $F(v'_{\perp}, v'_{\parallel}; t)$, e integrando sobre las variables primadas, los momentos $\langle v_{\perp}^2 \rangle(t+\tau) = 2T_{\perp}(t+\tau)$ y $\langle v_{\parallel}^2 \rangle(t+\tau) = T_{\parallel}(t+\tau)$ se relacionan con sus valores en t según

$$\frac{T_{\perp}(t+\tau) - T_{\perp}(t)}{\tau} = \langle 2D_{\perp\perp} + v_{\perp} A_{\perp} \rangle + O_{\perp}(\tau)$$

$$\frac{T_{\parallel}(t+\tau) - T_{\parallel}(t)}{\tau} = \langle 2D_{\parallel\parallel} + D_{\perp\parallel} + v_{\parallel} A_{\parallel} \rangle + O_{\parallel}(\tau).$$

Si se hace τ tender a cero, las relaciones anteriores coinciden con (5.13) cuando A_{\perp} y A_{\parallel} se sustituyen por sus correspondientes expresiones (5.23).

La expresión del propagador a tiempos cortos P_{τ} conduce pues a la correcta evaluación de los momentos asociados a la función F en el límite $\tau \rightarrow 0$, lo que justifica de nuevo el procedimiento de la sección 2.2.2 para la obtención del propagador a tiempos cortos recurriendo a una ecuación auxiliar del tipo Fokker-Planck. Para minimizar los restos $O_{\perp}(\tau)$ y $O_{\parallel}(\tau)$, con cualquier valor finito del paso temporal, es necesario recurrir a la redefinición de P_{τ} mediante correcciones de segundo orden en τ de forma iterativa durante el proceso iterativo. El procedimiento de actuación para este fin se ha presentado ya en los problemas unidimensionales abordados en capítulos anteriores. En este caso, el carácter bidimensional del problema sugeriría en principio el concurso de dos funciones de autocorrelación Ψ_{\perp} y Ψ_{\parallel} que contribuyan a la evolución correcta de T_{\perp}^n y T_{\parallel}^n . Al no conocerse las expresiones analíticas de $T_{\perp}(t)$ y $T_{\parallel}(t)$ ha de recurrirse a la ley analítica $3T(t) = 2T_{\perp}(t) + T_{\parallel}(t) = 3T_0$, que liga de forma unívoca las variaciones temporales de T_{\perp} y T_{\parallel} según $\dot{T}_{\parallel} = -2\dot{T}_{\perp}$.

Realmente sólo es necesaria una función de autocorrelación numérica Ψ_n . Siguiendo el procedimiento habitual que redefine el coeficiente asociado a la convección en la expresión de P_{τ} , los coeficientes A_{\perp} y A_{\parallel} (o bien D_{\perp} o D_{\parallel}) pasan a sustituirse respectivamente por $\Psi_n A_{\perp}$ y $\Psi_n A_{\parallel}$ en los argumentos de (5.27) cuando Ψ_n se define como

$$\Psi_{n+1} = \Psi_n + C_0 (T^n - T_0),$$

donde C_0 es una constante y $\Psi_0 = 1$. La diferencia $T^n - T_0$ representa un infinitésimo de segundo orden en τ si los coeficientes difusivos se hallan correctamente definidos. La oscilación de Ψ_n en torno a la unidad se estabiliza tras cierto número de iteraciones, preservando el valor de la energía cinética media inicial del sistema. La corrección es menor cuanto más se refine la red y menor sea el paso temporal. Aun para Δv_{\perp} y Δv_{\parallel} mayores

que los físicamente aceptables Ψ se estabiliza en un valor próximo a la unidad. El ajuste iterativo de la probabilidad de transición a tiempos cortos no merma las propiedades del operador integral de evolución, en tanto que no afecta a la conservación de la norma unidad de f_0 ni al carácter intrínsecamente positivo de la distribución. La estabilidad del esquema numérico tampoco se ve afectada por la corrección ya que Ψ_n muestra un comportamiento oscilatorio en cierto en torno de la unidad. Un cálculo incorrecto de los coeficientes difusivos incurre en un crecimiento incontrolado de la función de autocorrelación, lo que conlleva la anulación de las exponenciales implícitas en P_τ y la evolución de F^n hacia la solución trivial representada por el vector nulo. Así mismo, Ψ recoge los efectos de la discretización del problema, ajustándose a las características de la misma y redirigiendo la evolución en sentido físicamente aceptable. Es preciso señalar nuevamente que Ψ representa en último extremo la optimización de P_τ mediante una función dependiente del tiempo, dependencia añadida a la presencia implícita de t en los coeficientes A_α y $D_{\alpha\beta}$. El sentido físico de P_τ no queda en modo alguno encubierto por el concurso de Ψ , ya que la expresión del propagador a tiempos cortos no es única y la corrección establecida no altera la correcta definición de los momentos de dicho propagador. La no unicidad de P_τ licencia el procedimiento de ajuste establecido a posteriori sobre (5.27).

En los problemas simples unidimensionales tratados en capítulos previos se ha verificado la correcta evolución temporal de los momentos de primer y segundo orden de la distribución, en los que se concentra esencialmente la información física del sistema. La función Ψ propicia la conservación de la energía media del sistema, sin embargo cabe plantearse ahora si $T_\perp(t)$ y $T_\parallel(t)$ muestran también una evolución satisfactoria. Según las estimaciones de Kogan, [1, pág. 200], si la diferencia $\Delta = T_\perp - T_\parallel$ es reducida, Δ decae a cero de forma exponencial. Cabría pensar que Ψ habría de ser sustituida por dos funciones Ψ_\perp y Ψ_\parallel definidas como Ψ_n cuando $(T^n - T_0)$ se mutan por $T_\perp^n - T_0$ y $T_\parallel^n - T_0$ para dirigir la evolución de cada temperatura transversal hacia T_0 . Sin embargo, las diferencias entre las temperaturas anisótropas y T_0 no representan infinitésimos de orden τ^2 ya que éstas pueden diferir de T_0 en cualquier cantidad, de hecho, esta posibilidad destruye la correcta evolución de T^n . Por esta razón, se ha depositado en Ψ_n la responsabilidad de dirigir aceptablemente la evolución temporal del sistema. Se espera así que los rasgos inherentes al operador colisional, en cuanto a las magnitudes conservadas se refiere, contribuyan a este fin de forma satisfactoria. Al menos, la relación $\dot{T}_\parallel = -2T_\perp$ predice el uso de una sola función de autocorrelación, como se apuntó en el párrafo anterior. La evolución de Δ marca la existencia de un tiempo de termalización asociado al tiempo de relajación del sistema, cuyo significado físico es interesante para estimar el tiempo de evolución hacia la solución de equilibrio, que en problemas de carácter general no ha de coincidir con el equilibrio maxwelliano. Se ha verificado que si la diferencia $\Delta_0 = T_\perp|_0 - T_\parallel|_0$ es pequeña, Δ realmente decae de forma exponencial como preciden las estimaciones de Kogan, lo que inspira confianza en el ejercicio de la autocorrelación y motiva la suposición de que, para cualesquiera valores de Δ_0 , la evolución de Δ resulta fiable, contabilizando los efectos de la no linealidad

Con el fin de comprobar la eficiencia del operador integral de avance temporal en términos de la matriz \mathcal{Q} y verificar si la evolución de las temperaturas transversales es satisfactoria, se ha resuelto un problema previo no lineal de características semejantes a la ecuación cinética de la Física del Plasma, cuyo desarrollo se muestra en la sección siguiente.

5.4.2 Ejemplo preliminar.

Como se ha indicado, el concurso de la probabilidad de transición a tiempos cortos (5.27) para el esquema de avance integral (2.9) y la corrección inducida por Ψ , quedan plenamente justificadas para la resolución del problema. No obstante, son varias las cuestiones planteadas a lo largo de la exposición para la completa fiabilidad del operador integral. En primer lugar se apuntó la posible improcedencia de la integración sobre coordenadas cilíndricas del mismo modo que se procede en cartesianas. Este punto se ha solventado al contar con la derivación del propagador P_τ incluyendo la presencia de las variables v_\perp y v_\parallel y sus correspondientes rangos de variación sobre la recta real. Así mismo, la anulación de la corriente de probabilidad en las fronteras del espacio geométrico bidimensional conllevan la adecuada inclusión de tales condiciones de contorno para la implementación de F . La motivación para el uso de P_τ se ve refrendada por la integración analítica iterativa según (2.9) para un problema tipo Ornstein-Uhlenbeck

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{1}{r} - 2r - \frac{\partial}{\partial r} \right] P(r, t | r', 0)$$

dependiente, sólo de la variable radial ($r \Leftrightarrow v_\perp$) en coordenadas cilíndricas. El uso del propagador (5.27) integrado sobre la variable axial —distribución marginal de P_τ — se ha utilizado como probabilidad de transición a tiempos cortos para obtener P^n , cuya expresión para $n \rightarrow \infty$ y $n\tau \rightarrow t$ coincide con el propagador verdadero P . El uso de P_τ para el avance de F^0 queda así plenamente justificado. La segunda de las cuestiones planteadas se refiere a la correcta evolución del proceso de isotropización de las temperaturas transversales y la constancia de la energía del sistema. Para corroborar de un modo práctico las aserciones previas sobre la utilización de Ψ , se ha procedido al diseño de una ecuación de Fokker-Planck no lineal cuyo operador preserva como constantes las mismas cantidades que el operador colisional de Landau y para el cual $T_\perp - T_\parallel$ evoluciona en el tiempo según una ley conocida, a priori, de forma analítica. La resolución de este problema auxiliar permite fijar definitivamente el conjunto de parámetros implicados en la resolución numérica de la ecuación problema, sentando definitivamente los criterios prácticos de operación y justificando el uso del operador integral de evolución.

Si para la ecuación de Fokker-Planck (5.1), con la presencia única del término colisional, se definen los coeficientes D_i y D_{ij} como

$$D_i = -4 \int u_i f(\mathbf{v}, t) d\mathbf{v} \quad \text{y} \quad D_{ij} = \int (\delta_{ij} u^2 - u_i u_j) f(\mathbf{v}, t) d\mathbf{v}$$

donde $\mathbf{u} = \mathbf{v} - \mathbf{v}'$. El cambio a coordenadas cilíndricas, suponiendo f independiente de ϕ , deriva en la ecuación (5.4) o su equivalente (5.8) para un problema análogo al tratado en este capítulo en el que se preserva en el tiempo el valor de la energía cinética media. La ventaja de este problema estriba en el hecho de que las integrales sobre las variables angulares son inmediatas, lo que da de forma explícita el conjunto de coeficientes

$$\begin{aligned} D_{\perp\perp} &= T_\perp(t) + T_\parallel(t) + v_\parallel^2 & D_{\perp\parallel} &= -v_\perp v_\parallel & D_{\parallel\parallel} &= 2T_\perp(t) + v_\parallel^2 \\ D_{\phi\phi} &= v_\perp^2 + D_{\perp\perp} & D_\perp &= -4v_\perp & D_\parallel &= -4v_\parallel \end{aligned}$$

donde $T_{\perp}(t)$ y $T_{\parallel}(t)$ coinciden con las definiciones (5.12). En este caso, las componentes del vector de convección formal \mathbf{A} vienen dadas por

$$A_{\perp} = \frac{D_{\phi\phi} - D_{\perp\perp}}{v_{\perp}} + D_{\perp} = -3v_{\perp} \quad \text{y} \quad A_{\parallel} = -\frac{D_{\perp\parallel}}{v_{\perp}} + D_{\perp} = -3v_{\parallel}.$$

A la vista de los coeficientes anteriores, es fácil verificar que la variación temporal de T , (\dot{T}) es idénticamente nula en cualquier instante de la evolución, por lo que $T(t) = T_0$ será una magnitud conservada del problema. Así mismo, la diferencia $\Delta = T_{\perp}(t) - T_{\parallel}(t)$ evoluciona según la ley

$$\frac{d\Delta}{dt} = -12 \Delta(t) ; \quad \Delta(t) = \Delta_0 e^{-12 t}$$

donde Δ_0 es $\Delta(t=0)$. El decaimiento exponencial de Δ muestra que el tiempo de termalización del sistema es $\tau_t = 1/12$. El carácter no lineal del problema se manifiesta claramente en la dependencia en t de los coeficientes del tensor de difusión a través de $T_{\perp}(t)$ y $T_{\parallel}(t)$, lo que obliga a recalcular en cada iteración todos los $D_{\alpha\beta}$ con F^n para el cálculo de F^{n+1} , al igual que en la ecuación cinética del plasma. La solución estacionaria F_s coincide con la solución de equilibrio maxwelliano (5.10), con $T_{\perp} = T_{\parallel} = T_0$. La figura 5.3 muestra la evolución numérica de T_{\perp} y T_{\parallel} así como de $\Delta(t)$.

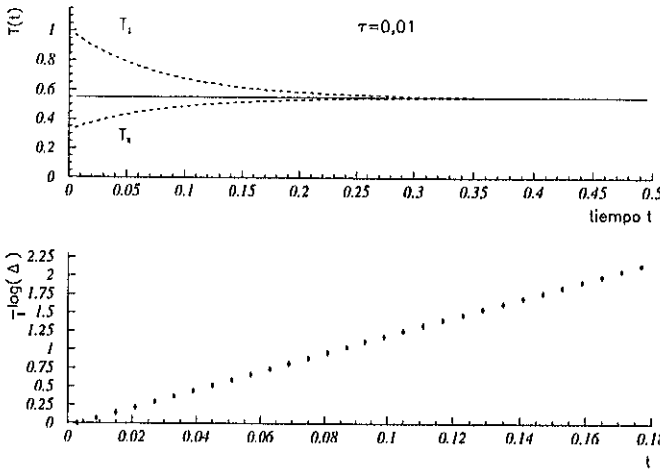


Figura 5.3: Temperaturas transversales T_{\perp} y T_{\parallel} en la aplicación previa.

Evolución de $T_{\perp}(t_n)$ y $T_{\parallel}(t_n)$ en 50 iteraciones. A pesar del elevado valor del paso temporal (1/8 del tiempo de relajación teórico 1/12) el tiempo de termalización para la solución numérica integral coincide con el estimado analíticamente, como se aprecia en la representación de $\log(\Delta)$ frente al tiempo.

La resolución numérica de la ecuación no lineal en F para el nuevo problema se consume procediendo del modo expuesto en la sección previa. El conocimiento de la ley analítica

para la evolución de las temperaturas transversales, así como la existencia de una solución única de equilibrio F_s , favorecen el estudio de la eficiencia del modelo numérico, mostrando así mismo la efectividad del operador integral en cuanto a las propiedades de convergencia y el estudio de los tiempos de evolución.

Los valores v_{\perp}^{max} y v_{\parallel}^{max} se han elegido de forma que tanto F como P_{τ} se anulen numéricamente sobre las rectas frontera, de tal modo que la contribución de F sobre tales puntos al valor de T^n resulte despreciable. Para ello basta tomar v_{α}^{max} del orden de 5 unidades, con una red 40×80 . La tasación de las normas $N_r(I')$ de (5.29) ofrece un índice orientativo sobre la precisión introducida por los parámetros de la discretización. Si estas normas difieren de la unidad sólo sobre aquellos pares (i', j') suficientemente cercanos a los bordes de la retícula espacial, la evolución del vector F^n y el ajuste iterativo de Ψ_n resultan ampliamente satisfactorios. Incluso para valores de Δv_{\perp} y Δv_{\parallel} del orden de 0,2 (red 25×50) la función de autocorrelación no excede en más de un 10 por ciento de su valor inicial $\Psi_0 = 1$. La representación de Δ en escala logarítmica frente a $t_n = n\tau$ reproduce una recta perfecta cuya pendiente se aproxima notablemente a $1/\tau_l = 12$. El valor de la pendiente se desvía de la esperada si los parámetros de red Δv_{\perp} y Δv_{\parallel} aumentan, en cuyo caso también los valores de las normas numéricas N_r se desvían de la unidad para puntos interiores de la retícula, desvirtuando así la evolución física de F^n . La gráfica adjunta ilustra este resultado para $\Delta v_{\perp} = \Delta v_{\parallel} = 0,1$ en una red 50×100 , con $T_0 = 0,5$. Por otra parte, la convergencia hacia la distribución gaussiana de f a medida que se aumenta el número de iteraciones es inequívoca, siempre que el paso temporal τ se elija de forma adecuada. Al igual que en los problemas lineales unidimensionales se ha verificado que es suficiente tomar para τ el valor de un décimo del tiempo de termalización estimado previamente con valores reducidos de τ , si éste es entendido ahora como tiempo de relajación; en el caso representado se ha tomado $\tau = 0,005$. La elección de un paso temporal más pequeño ha de ir acompañada inevitablemente por un refinamiento de la red. No obstante, el algoritmo de reducción del número de integraciones, mediante el procedimiento de las elipses de equiprobabilidad, disminuye drásticamente el tiempo de computación. La condición inicial f_0 se ha elegido (figura 5.4), como en los casos anteriores, representada por un producto de funciones ventana $\xi(a, v, b)$ sobre cada eje coordenado, centrada en un punto $(v_{\perp}^0, v_{\parallel}^0)$ con $\langle v_{\parallel} \rangle_0 = 0$. La solución numérica estacionaria es independiente de la condición inicial f_0 , como cabría esperar. Los resultados se muestran en la figura 5.4

En cierto modo, el problema simple resuelto aquí muestra un comportamiento similar al esperado para la distribución f de las partículas del plasma, pues los coeficientes difusivos de la ecuación cinética muestran comportamientos análogos a los presentados por los coeficientes de aquél. La correcta evolución de f apoya nuevamente la confianza en el método integral para problemas de más de una dimensión y confirma la validez del parámetro Ψ_n para el ajuste de las cantidades conservadas. La solución numérica se comporta como la obtenida por métodos implícitos en diferencias sobre problemas lineales, con la ventaja de que todas las derivadas de D_{α} , $D_{\alpha\beta}$ y de la propia función F , se incluyen en la representación de P_{τ} , eliminándose el problema de las derivadas cruzadas que en los esquemas en diferencias suelen tratarse de forma explícita reduciendo el valor τ , por la dificultad introducida para la inversión matricial sobre las matrices de evolución, cuando estos términos se tratan de forma implícita.

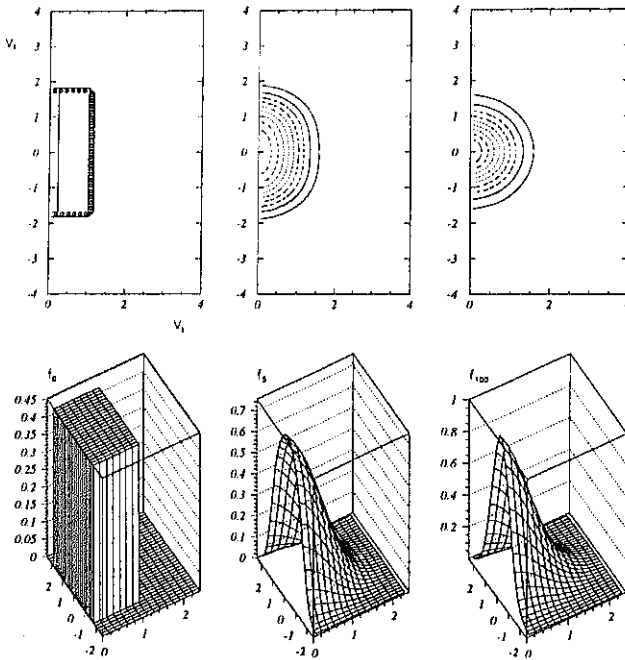


Figura 5.4: Evolución de $f(v_{\perp}, v_{\parallel}; t)$. (Ejemplo preliminar).

Evolución de $f(v_{\perp}, v_{\parallel}; t)$. La condición inicial es un histograma de energía T_0 igual a la estacionaria. Las gráficas superiores representan las curvas de nivel de cada superficie en la situación inicial, al cabo de 5 iteraciones y en 100 iteraciones con $\tau = 0,005$. f permanece prácticamente estacionaria a partir de 40 iteraciones.

5.5 Resultados.

La elección de la probabilidad de transición a tiempos cortos dada por (5.27) responde a una distribución normalizada a la unidad para cualesquiera valores de τ y de los coeficientes difusivos evaluados en las variables primadas. El cálculo numérico de la norma de $P_{\tau}(v, v'|t)$ se ha erigido como un índice óptimo para la eficiencia del método integral de avance temporal. Si las normas $N_r(I')$ del propagador coinciden a efectos prácticos con la unidad para puntos $(v_{\perp i'}, v_{\parallel j'})$ sobre los que F_i^n es significativamente mayor que cero, la evolución de F^n es satisfactoria. El procedimiento utilizado en todos los problemas para el cálculo de P_{τ} genera una expresión para este propagador del que se desprenden los momentos correctos, D_{α} y $D_{\alpha\beta}$, de la ecuación de Fokker-Planck original, en el sentido indicado por las definiciones de los mismos según el desarrollo de Kramers-Moyal.

Existen en la literatura numerosas expresiones para el propagador a tiempos cortos, cuya norma coincide con la unidad sólo en el límite $\tau \rightarrow 0$, por lo que resultan inoperantes

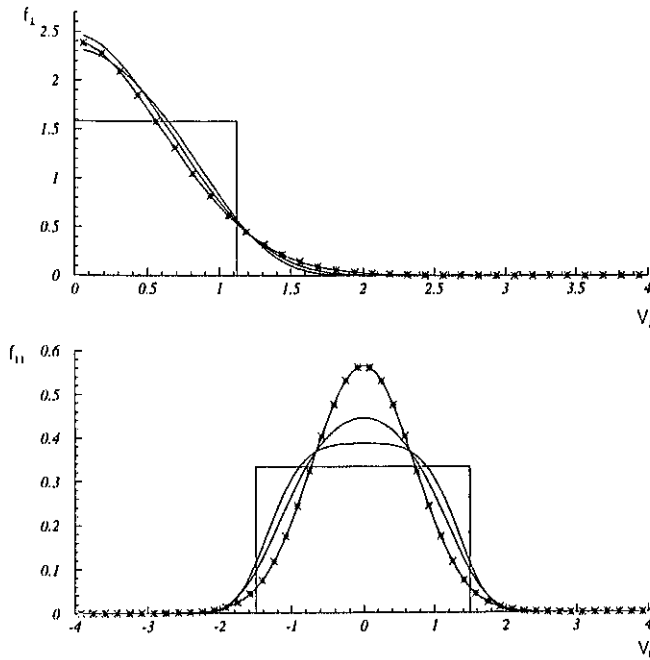


Figura 5.5: *Distribuciones marginales.*

Distribuciones marginales $f_{\parallel}(v_{\parallel}, t) = \int v_{\perp} f dv_{\perp}$ y $f_{\perp}(v_{\perp}, t) = \int f dv_{\parallel}$ en línea continua. Las marcas * dan el valor numérico de cada distribución analítica en el equilibrio sobre el punto medio de la celda.

para un esquema numérico de integral (véanse las secciones 2.2.1 y 2.2.2) en el que τ es finito en todo el proceso. Por otra parte, la pretensión del esquema integral es evaluar directamente la propia función de distribución sin derivar una expresión analítica previa del propagador para cualquier valor de t pues, entre otras razones, el estudio del proceso integral se ha encaminado hacia problemas en los que los coeficientes difusivos de la ecuación de Fokker-Planck dependen de la propia distribución.

Con el problema preliminar tratado anteriormente se ha verificado que todas las características atribuidas al método numérico integral para problemas unidimensionales, siguen vigentes para ecuaciones de Fokker-Planck en más de una dimensión. La expresión del propagador a tiempos cortos P_{τ} se ha mostrado eficiente para el avance de la distribución en coordenadas cilíndricas. En la obtención de P_{τ} se ha contado con la aproximación de que, para pequeños valores de τ , todos los coeficientes de convección y difusión pueden considerarse evaluados sobre \mathbf{v}' en el instante t_n . Esta característica supone físicamente que el alcance de los fenómenos convectivos y difusivos no afecta a partículas con velocidades alejadas de \mathbf{v}' en la escala temporal establecida por τ . La presencia implícita en \mathbf{v} inducida

por las condiciones de geometría, representada en el término $1/v_{\perp}$, se ha tratado como tal, sin mutar este término por $1/v'_{\perp}$. Así, la presencia en P_{τ} de los coeficientes tasados en las variables primadas no incluye la presencia de factores geométricos que den lugar a términos espúreos sobre las componentes reales de los coeficientes convectivos. En este sentido, debe notarse que la ecuación de Fokker-Planck asociada a F presenta un término convectivo formal $D_{\phi\phi}/v_{\perp} + D_{\perp}$ en el que $D_{\phi\phi}/v_{\perp}$ proviene de la simetría esférica, representando una convección espúrea. Por consiguiente, en P_{τ} se incluyen sólo coeficientes difusivos dotados de pleno significado físico, responsables de la evolución de F hacia la solución de equilibrio. Las características físicas de estos coeficientes, representativos de los procesos de colisiones binarias bajo interacción columbiana, contribuyen al hecho de que la velocidad de cada partícula del sistema no varíe drásticamente en una escala temporal reducida, lo que refuta la tesis que inspira el tratamiento de los coeficientes característicos evaluados sobre las variables primadas. En definitiva, la aproximación del propagador verdadero $\Pi(v, t + \tau | v', t)$ por P_{τ} resulta apropiada aun para valores de τ mayores que los utilizados desde un punto de vista estrictamente numérico motivado por la aproximación en diferencias de las derivadas temporales.

Sobre una red 40×80 con $v_{\perp}^{max} = v_{\parallel}^{max} = 5$ y para valores del paso temporal incluso cercanos a la unidad, cualquier condición inicial F_0 deriva inequívocamente en la solución numérica equivalente a (5.10) que representa el equilibrio maxwelliano. Es obvio que el refinamiento de la red mejora el tratamiento numérico del problema, como se aprecia fundamentalmente en una oscilación reducida de la autocorrelación Ψ que se estabiliza en un valor muy próximo a la unidad. Los coeficientes de difusión y convección se recalculan en cada iteración si el paso temporal se elige relativamente grande. Para un paso temporal reducido, el cálculo de estos coeficientes es necesario en cada iteración sólo cuando se ha optado por representar la condición inicial f_0 como una distribución que presente discontinuidades (tipo onda cuadrada). Si f_0 es una función continua de comportamiento suficientemente regular, los coeficientes difusivos se aproximan a los obtenidos para la distribución normal de equilibrio, por ello sólo es necesario recalcularlos cada cierto número de iteraciones o reemplazarlos, a partir de cierta iteración, por los correspondientes a los del equilibrio maxwelliano. El mayor tiempo de computación lo consume el cálculo de todos los D_{α} y $D_{\alpha\beta}$ debido a la doble suma sobre las funciones auxiliares (5.16). La integración sobre los índices primados en el esquema de avance (5.30) queda reducida a un entorno del punto $(v_{\perp i}, v_{\parallel j})$ que no excede de cinco celdas para cualquier valor físicamente aceptable de τ . El tiempo de computación sobre la red indicada es del orden de 10 segundos por iteración en un VAX-9000 si se recalculan en cada paso los coeficientes de convección y difusión, y del orden de 3 segundos si éstos se consideran fijos. La estabilidad del esquema numérico es absoluta, con independencia de los parámetros de red, al igual que sucede en esquemas equivalentes para problemas unidimensionales.

Dado que los coeficientes de difusión decaen a cero cómo $1/v$ (si $v \rightarrow \infty$) los valores de τ aconsejables han de ser relativamente mayores que los permitidos para un esquema en diferencias, pero esta limitación no supone en modo alguno la alteración de las propiedades del propagador utilizado para el cálculo de los elementos de la matriz de evolución. Ya que el máximo del determinante D_t se halla en las cercanías de origen, el comportamiento de P_{τ} en estos puntos no presenta problemas. La norma de P_{τ} sólo difiere de la unidad en las proximidades de las fronteras, donde D_t disminuye. Sobre estos puntos F^n puede

considerarse nula, por lo que la contribución a F^{n+1} es depreciable. Por otra parte, el determinante D_t tiende a cero en los extremos de la red, por lo que $Q_{I,I'}^n$ se aproxima a la función $\delta_{ii'}\delta_{jj'}$, lo que hace que las colas de la distribución evolucionen más lentamente que la zona central de F^n .

Partiendo de una condición inicial F^0 de la que se desprendan temperaturas transversales T_{\perp} y T_{\parallel} distintas, es posible contemplar la evolución numérica de la diferencia $\Delta = T_{\perp}(t) - T_{\parallel}(t)$, observándose un decaimiento prácticamente exponencial, especialmente para pequeños valores de Δ , como predicen las estimaciones de Kogan. El tiempo de termalización puede calcularse de forma sencilla por parametrización de la curva obtenida al representar $\log(\Delta)$ frente al tiempo, como se muestra en la *figura* 5.6. El logaritmo de esta curva es casi una línea recta, *figura* 5.6, cuya pendiente proporciona el tiempo de termalización. La variación de las temperaturas anisótropas provoca la confluencia de las mismas hacia T_0 en un sentido con pleno significado físico. La presencia de la autocorrelación Ψ_n sólo acomoda de forma iterativa la expresión de P_r a las características conservativas del operador colisional. La dependencia en el tiempo de la probabilidad de transición no sólo queda así recogida en los coeficientes difusivos (*figuras* 5.1 y 5.2), sino que se amplía mediante el concurso de la función de autocorrelación. El comportamiento oscilante de Ψ puede contemplarse en la *figura* 5.6.

Las *figuras* de 5.7 muestran la evolución de f_0 hasta la solución maxwelliana de equilibrio. Puede apreciarse en las curvas de nivel la isotropización progresiva de la distribución. No obstante, en la *figura* 5.5 se han representado las distribuciones marginales

$$f_{\perp}(v_{\perp}, t) = \int f(v_{\perp}, v_{\parallel}; t) dv_{\parallel} \quad \text{y} \quad f_{\parallel}(v_{\parallel}, t) = \int v_{\perp} f(v_{\perp}, v_{\parallel}; t) dv_{\perp}$$

a través de las cuales se contempla más claramente la evolución hacia el equilibrio maxwelliano.

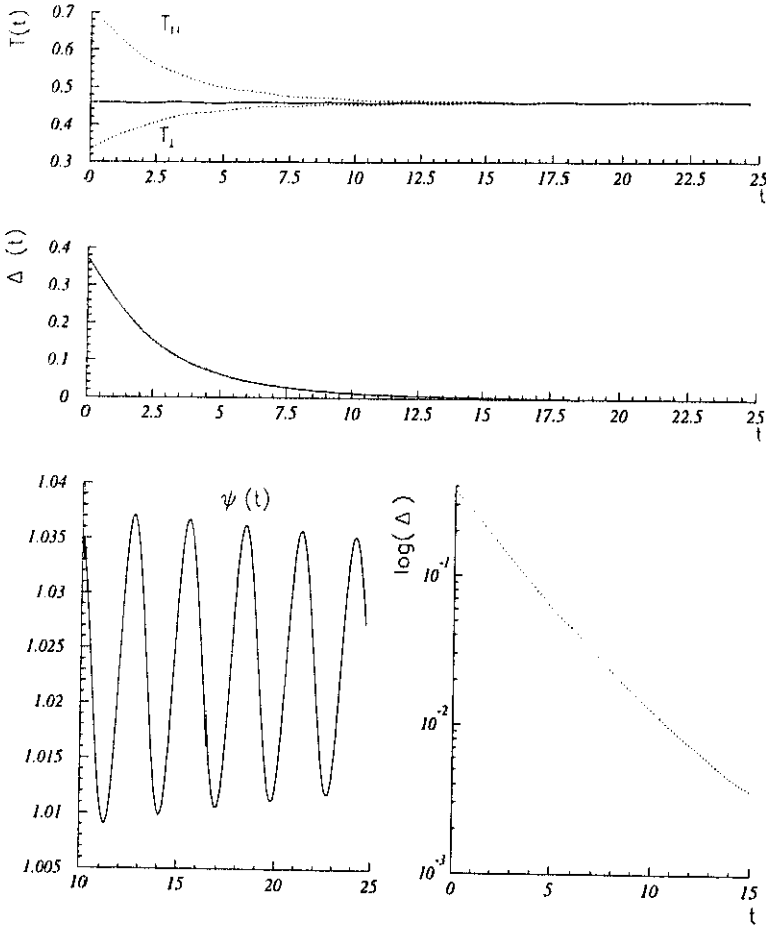


Figura 5.6: Temperaturas transversales $T_{\perp}(t)$ y $T_{\parallel}(t)$ en plasma. Termalización.

Comportamiento de las temperaturas transversales y de la diferencia $\Delta = T_{\perp} - T_{\parallel}$ en el tiempo. El decaimiento de Δ es casi exponencial, como se contempla en la representación de $\log(\Delta)$. La oscilación de T , línea continua, se atenúa a medida que t aumenta, estabilizándose en su valor inicial, ya que la autocorrelación ψ muestra oscilaciones amortiguadas.

5.5. Resultados.

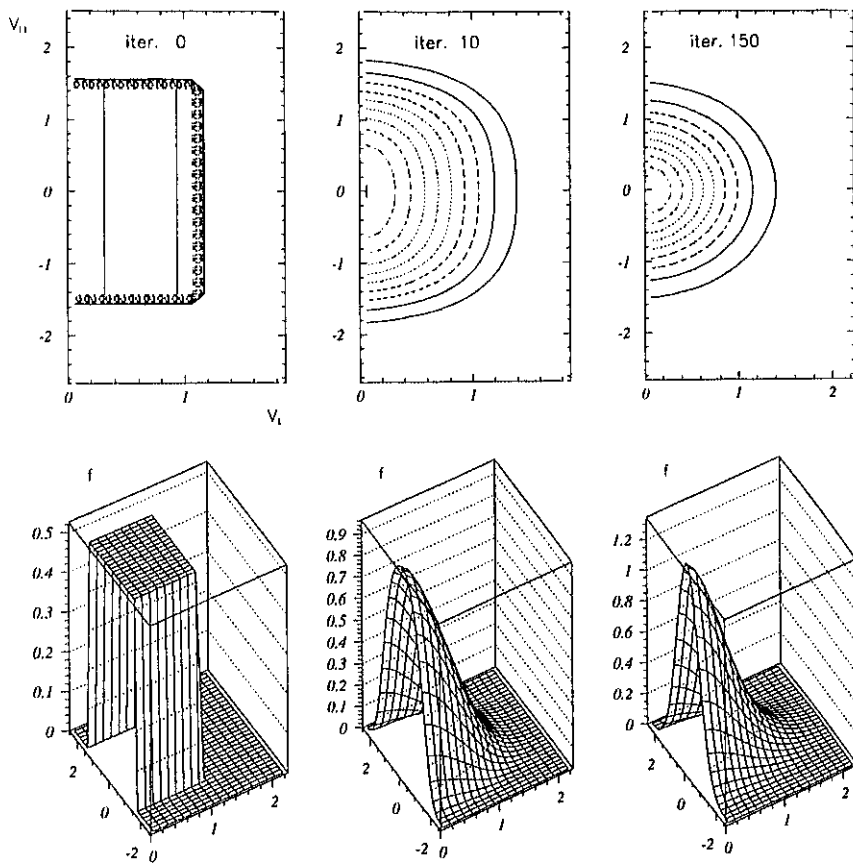


Figura 5.7: Distribución $f(v_{\perp}, v_{\parallel}; t)$. Estado de equilibrio.

Curvas de nivel y superficies representativas de la distribución f en tres momentos de la evolución partir de 100 iteraciones f permanece prácticamente estacionaria en el intervalo representado. las colas de la distribución requieren más tiempo de evolución para ajustarse a la Maxwellian equilibrio.

Bibliografía

- [1] B.A. Trubnikov, *Reviews of Plasma Physics* 1, vol. I, (Consultants Boureau, New York, 1965). p105
- [2] C.F.F. Karney, *Comp. Phys. Rep.* 4(1986),183. y
C.F.F Karney and N.J. Fish, P.P.P.L. report, PPPL-2222(1985).
- [3] S. Chapman and T.G. Cowling: *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gasses*, 3rd. ed., (Cambridge University Press, Cambridge, 1970).
- [4] M. Abramowitz and Irene A. Stegun: *Handbook of Mathematical Functions*, (Dover, New York 1968)
- [5] C. W. Gardiner: *Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry and Natural Sciences*, Springer Ser. Synergetics, Vol. 13 (Springer, Berlin, Heidelberg, New York) 1987
- [6] E. Wong, *Am. Math. Soc. Proc. of 16th Symp. on App. Math.* (1964)264
- [7] U. Deininghaus and R. Graham, *Z. Phys.* B34 (1979)211

Conclusiones

- 1.- Se ha configurado un método numérico para ecuaciones de Fokker-Planck basado en la ecuación integral de evolución (2.9) para la distribución f . El método resulta aplicable a ecuaciones con coeficientes difusivos dependientes del tiempo, ya sea explícitamente o a través de una relación funcional con f .
- 2.- El método propuesto en la sección 2.2.2 para determinar la expresión de un propagador a tiempos cortos, apto para cada problema, se ha mostrado altamente eficiente. Las condiciones de frontera quedan contabilizadas en la probabilidad de transición, por lo que no es imprescindible recurrir a la simulación numérica de las mismas mediante esquemas que distorsionen el significado físico del problema.
- 3.- La ductibilidad en la elección del propagador P_τ favorece el ajuste del mismo con el fin de mantener constantes más de una cantidad conservada, si ésta existe en el problema continuo. El método basado en el ajuste iterativo durante el ejercicio de la computación se ha revelado como el más indicado, en tanto que el procedimiento adapta P_τ contabilizando simultáneamente los efectos de la discretización en el tiempo y en las variables espaciales.
- 4.- Dado que P_τ es solución de una ecuación de Fokker-Planck auxiliar, se preservan todas las propiedades satisfechas por el propagador verdadero Π para τ pequeño. El decaimiento exponencial de P_τ y el carácter positivo de éste favorece la no existencia de inestabilidades en el esquema numérico. La función f preserva la norma unidad y la positividad, siendo en cada etapa de la evolución una función bien comportada en sentido de la teoría de distribuciones.
- 5.- Se han dado las expresiones de P_τ para las ecuaciones integro-diferenciales de Fokker-Planck en simetrías esférica y cilíndrica. Ambos casos se ha

resuelto de forma satisfactoria, dotando al esquema numérico de pleno significado físico, con tiempos de evolución coincidentes con estimaciones teóricas, sin recurrir a linealizaciones. La descripción del régimen transitorio es satisfactoria, en tanto que f preserva las cantidades conservadas del sistema, evolucionando de acuerdo con las características físicas del problema continuo.

- 6.- El esquema numérico integral preserva la densidad de partículas y la energía del sistema, con independencia del número de iteraciones. La perfecta descripción del estado estacionario condiciona futuras aplicaciones del método para la resolución de problemas con mayor significado físico.

Apéndice A

Tratamiento del Término

$$\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{v}, \mathbf{r}; t).$$

La tendencia más comunmente adoptada para la resolución de la ecuación integral de Fokker-Planck (1.7) es la de no abordar situaciones con variación espacial, con lo que el problema se reduce al tratamiento del plasma en el espacio de velocidades. Sin embargo, hay situaciones en las que los procesos convectivos en el espacio real pueden ser significativos y el problema ha de abordarse en el espacio de fases completo.

El procedimiento numérico para la resolución de la ecuación de Fokker-Planck se inspira en la posibilidad de avanzar temporalmente cualquier condición inicial, mediante la expresión de un propagador o probabilidad de transición, válida para cortos intervalos de evolución. La expresión habitual para este propagador es la distribución gaussiana (2.13), cuya existencia se asegura siempre que la matriz que representa el tensor de difusión \mathcal{D} sea invertible, lo que supone la condición $D_i = \|\mathcal{D}\| \neq 0$ para el determinante de \mathcal{D} . La expresión completa de la ecuación de Fokker-Planck para la Física del Plasma, incluye la dependencia de las variables espaciales $\{\mathbf{r}\}$ a través del término $-v_i \partial / \partial x_i$. Es obvio que los elementos $D_{z_i v_j}$ y $D_{z_i z_j}$ del tensor de difusión son nulos, lo que impide la aplicación de (2.13) para el esquema de avance (2.9). En principio, esta situación puede solventarse concediendo al término espacial un tratamiento en diferencias finitas, para cada variable $\{\mathbf{v}\}$ fija, y avanzar posteriormente para $\{\mathbf{r}\}$ fija la distribución $f(\mathbf{v}, \mathbf{r}; t)$ mediante el operador colisional integral en el espacio de velocidades dado en los capítulos anteriores. Este procedimiento, sin embargo, puede conducir a tiempos de evolución en los espacios de posiciones y momentos inapropiadamente correlacionados para ciertos valores del paso temporal τ , de ahí el intento de configurar un operador numérico plenamente integral, que dé respuesta a la evolución de f en el espacio de configuración $\{\mathbf{q} = (\mathbf{v}, \mathbf{r})\}$ de forma satisfactoria.

A.1 Propagador para EFP con tensor \mathcal{D} singular.

Continuando con el carácter paradigmático desarrollado a lo largo de la exposición, la cuestión que ocupa este apéndice se resuelve por extensión de soluciones propuestas al efecto para problemas lineales simples. Como punto de partida se ha estudiado la ecuación de Klein-Kramers (referencia

[11, pág. 9] en el Capítulo 4)

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -v \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial v} \left[D_v + \frac{F(x)}{m} - \frac{\partial}{\partial v} D_{vv} \right] f(v, x; t) \quad (\text{A.1})$$

para la evolución de la distribución f en el espacio de velocidad y posición de partículas en movimiento Browniano, en la que $D_v = -\gamma v$ y $D_{vv} = D = \gamma KT/m$ siendo m la masa de la partícula, KT la temperatura en unidades de energía, $F(x)$ una fuerza exterior y γ el coeficiente de fricción. La ecuación diferencial estocástica del proceso

$$\begin{cases} \dot{x} = v \\ \dot{v} = -\gamma v + F(x)/m + \Gamma(t) = a(v, x) + \Gamma(t) \\ D = \frac{1}{2} \langle \Gamma(t') \Gamma(t) \rangle \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

se sintetiza en la relación $m\ddot{x} + m\gamma\dot{x} = F(x) + m\Gamma(t)$, representando un proceso markoviano de segundo orden en la variable temporal t . Se observa que, para pequeños valores del tiempo de evolución $\tau = t - t' > 0$, los momentos \bar{x} y \bar{v} , con respecto a la probabilidad de transición P , se expresan como

$$\bar{v}(t' + \tau) = v' + a(v', x')\tau \quad \text{y} \quad \bar{x}(t' + \tau) = x' + v'\tau + \frac{1}{2}a(v', x')\tau^2 \quad (\text{A.3})$$

si $\bar{q}_i(t = t') = q'_i$. Las identidades anteriores son válidas para cualquier expresión de la fuerza determinista total $F(v, x) = m a(v, x)$, que aquí coincide con $F(x) - \gamma v$, responsable de los fenómenos convectivos observables a través del comportamiento de f . Así mismo, la tasación de los momentos \bar{x}^2 , \bar{xv} y \bar{v}^2 lleva a los valores de las desviaciones σ_{ij}^2

$$\sigma_{vv}^2 = 2D\tau, \quad \sigma_{xv}^2 = D\tau^2 \quad \text{y} \quad \sigma_{xx}^2 = \frac{2}{3}D\tau^3 \quad (\text{A.4})$$

para $\tau \rightarrow 0$, lo que muestra que la difusión en el espacio de posiciones está dominada por un coeficiente difusivo formal del orden de τ^2 . Si el término $a(v, x)$ se trata como constante, es sencillo verificar que la solución a la ecuación (A.1) conserva la forma habitual de una distribución normal similar a (2.13), en la que la ausencia de los coeficientes D_{xv} y D_{xx} se halla suplida por sendos coeficientes difusivos formales proporcionales a σ_{xv}^2 y a σ_{xx}^2 . Para ello basta resolver la ecuación en P con $F(x)$ constante y $\gamma = 0$ mediante el procedimiento habilitado por la aplicación de transformadas de Fourier sobre las variables v y x , como se muestra en los párrafos siguientes. Si (A.1) admite solución analítica exacta en el caso simple de $F(v, x) = ma(v, x)$ constante,¹ el procedimiento para calcular la probabilidad de transición a tiempos cortos correspondiente a la ecuación general

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -v \frac{\partial P}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial v} \left[D_v(v, x; t) + \frac{F(x; t)}{m} - \frac{\partial}{\partial v} D_{vv}(v, x; t) \right] P(v, x; t|v', x'; t'), \quad (\text{A.5})$$

mediante el método de la sección (2.2.2), consistirá esencialmente en determinar la expresión apropiada del operador auxiliar de Fokker-Planck L_{FP}^* en el que la convección $A = D_v + F/m$ y la difusión D se supongan evaluadas sobre las variables (v', x') . Si $\delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$ se representa en la forma $\delta = \delta(v - v') \delta(x - x')$, el término $L_{FP}\delta$ de la expresión $P(t+\tau) = [1 + \tau L_{FP}] \delta + O(\tau^2)$ puede reescribirse como

$$L_{FP}\delta = -v \frac{\partial}{\partial x} \delta - \frac{\partial}{\partial v} \left[A' - \frac{\partial}{\partial v} D' \right] \delta = L_{FP}^* \delta,$$

¹No este el único caso en el que la ecuación de Klein-Kramers presenta solución analítica. Es bien sabido que el problema del movimiento browniano se halla resuelto para diferentes expresiones de $F(x)$ con D constante, véase por ejemplo [11, pág. 87] y las referencias aquí contenidas.

que define el operador auxiliar apropiado para determinar una expresión de P_τ . La representación de la función δ de Dirac en el cálculo del propagador a tiempos cortos responde simplemente a la solución formal de la nueva ecuación de Fokker-Planck para $P_\tau(v, x|v', x'; \tau)$

$$\dot{P}_\tau = \frac{\partial P_\tau}{\partial \tau} = \mathbf{L}_{FP}^* P_\tau, \tag{A.6}$$

en la que las magnitudes $A' = D_v(v', x'; t) + F(v', x'; t)/m$ y $D' = D_{vv}(v', x'; t)$ se tratan como parámetros constantes.

Siguiendo el procedimiento de cálculo mostrado en la reciente referencia [7] citada en el Capítulo 4, en la que el autor aborda la resolución de la ecuación para la densidad de probabilidad de un proceso estocástico no markoviano de segundo orden (en el sentido de (A.2)), sobre la ecuación auxiliar en P_τ se ha tomado la transformada de Fourier

$$\mathcal{F}(P_\tau) = \tilde{P}(\omega, k; \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega v - ikx} P_\tau dv dx,$$

con lo que (A.6) se reduce a

$$\dot{\tilde{P}} = \left[k \frac{\partial}{\partial \omega} - i\omega A' - \omega^2 D' \right] \tilde{P}; \quad \tilde{P}(\tau = 0) = e^{-i\omega v' - ikx'}. \tag{A.7}$$

Esta ecuación diferencial puede resolverse por el conocido método de las *características*, con la condición inicial $\tilde{P}(\omega, k; 0)$ anterior, para dar

$$\tilde{P} = \exp \left[-\frac{D'}{3} (k^2 \tau^3 + 3\omega k \tau^2 + 3\omega^2 \tau) - i\omega(v' + A'\tau) - ik(x' + v'\tau + \frac{1}{2}A'\tau^2) \right].$$

Recurriendo a la fórmula de inversión para transformadas de Fourier, se obtiene la expresión definitiva para la probabilidad de transición

$$P_\tau = \frac{\sqrt{3}}{2\pi\tau^2 D'} \exp \left[-\frac{1}{D'\tau} \left(3\frac{X^2}{\tau^2} - 3\frac{XV}{\tau} + V^2 \right) \right] \tag{A.8}$$

donde se han definido las variables X y V como

$$V = v - v' - A'\tau, \quad \text{y} \quad X = x - x' - v'\tau - \frac{1}{2}A'\tau^2$$

que se corresponden con las expresiones $v - \bar{v}$ y $x - \bar{x}$ en coherencia con (A.3). Es evidente que la convección sufrida por la distribución en el espacio de posiciones, está regida por un coeficiente efectivo de valor $v' + A'\tau$ para cortos intervalos τ de evolución, mientras que en el espacio de velocidades el término convectivo sigue representado por $A' = F'/m$. Este resultado se exhibe de forma más clara si se analiza la distribución marginal $P_\tau(x, x')$ obtenida al integrar (A.8) sobre la variable v

$$P_\tau(x, x') = \sqrt{\frac{3}{4\pi D'\tau^2}} \exp \left[-\frac{3}{4D'\tau^3} \left(x - x' - v'\tau - \frac{1}{2}A'\tau^2 \right)^2 \right]$$

en la que se aprecia la presencia de dispersión gobernada por un coeficiente de difusión efectivo proporcional a τ^2 . La difusión en el espacio de posiciones es pues un factor τ^2 más lenta que en el espacio de velocidades ($D_{vv} = D'$).

Como se ha venido mostrando a lo largo de este trabajo, la expresión del propagador no es única y pueden derivarse diferentes operadores intergrales equivalentes que representan el mismo problema en el límite $\tau \rightarrow 0$. En particular, si el término $v\partial/\partial x \cdot \delta(v - v')$ de $\mathbf{L}_{FP}^* \delta$ se interpreta

como $v' \partial/\partial x \delta(v - v')$, la expresión alternativa del propagador originada por el nuevo operador auxiliar es la distribución normal *degenerada* o *impropia*

$$P_{\tau}^{(II)} = \frac{1}{\sqrt{4\pi D'\tau}} \exp\left[-\frac{V^2}{4D'\tau}\right] \delta(x - x' - v'\tau) = P_{\tau}(v, v'|x') \delta(x - x' - v'\tau)$$

que proporciona la ecuación de evolución para f

$$f(v, x; t + \tau) = \int P_{\tau}(v, v'|x' = x - v'\tau) f(x' = x - v'\tau, v'; t) dv'. \quad (\text{A.9})$$

Un resultado análogo se obtiene al proceder en (A.8) al límite $\tau^3 \rightarrow 0$ manteniendo τ fijo (ya que, si $\tau \ll 1$ se tendrá que $\tau^3 \ll \tau$). En este caso $x' + v'\tau$ ha de cambiarse por $x' + (v + v')\tau/2$, lo que equivale a reemplazar el desplazamiento $v'\tau$, correspondiente a un movimiento determinista uniforme, por el desplazamiento medio $(v + v')\tau/2$ de un movimiento con aceleración A' constante. En ambos casos se aprecia claramente que en la ecuación de evolución A.9 sólo se contienen los efectos convectivos en el espacio de las posiciones. Tal esquema integral de evolución es válido si predominan los efectos de deriva en el espacio real sobre los dispersivos. Hitchon en [18, del cap. 1] ofrece un propagador análogo que, por tanto, atiende únicamente a procesos convectivos en el espacio físico. Sin embargo, este propagador es equivalente al obtenido al interpretar un esquema en diferencias explícito como la integral sobre una probabilidad de transición compuesta por funciones $\delta(x_i - x_{i\pm 1})$. El alcance de la deriva desde x a $x' + \tau v'$ puede ser mayor que el de un espaciado de red Δx si la velocidad es grande. La transmisión de toda la información en el instante t puede limitarse notablemente hasta el instante $t + \tau$, razón que fuerza a tomar valores del paso temporal excesivamente pequeños, como en los esquemas explícitos en diferencias. La ventaja del método integral estriba esencialmente en la posibilidad práctica de elegir pasos τ relativamente grandes y acortar así el tiempo de computación, a pesar de que crezca el número de elementos no nulos de la matriz de evolución. Dado que la resolución del problema ha de ejecutarse de modo numérico para τ finito, los dos operadores anteriores pueden ocasionar un retardo en los tiempos de evolución para f en el espacio de posiciones, al no contabilizarse en ellos los coeficientes de correlación σ_{xv}^2 y σ_{xx}^2 responsables físicamente de la difusión efectiva en dicho espacio. Este inconveniente es de nuevo similar al argumentado en contra del uso de un esquema simple en diferencias, combinado con el integral en v , para el tratamiento del término $x\partial/\partial v$ en la ecuación diferencial. Así pues, para cualquier valor finito de τ y de τ^3 , resulta conveniente la aplicación del operador integral derivado de (A.8).

A.2 Caso (2N)-dimensional. Generalización.

En la mayoría de los problemas físicos de interés, en los que se ha aplicado el método numérico integral, se opera simultáneamente en el espacio de posiciones y momentos en más de una dimensión. Es conveniente, por tanto, ofrecer una generalización del problema anterior a fin de inferir la expresión del propagador P_{τ} cuando en la ecuación de Fokker-Planck en las componentes de v se cuenta con el término $v \cdot \nabla f$. A pesar de que este método puede resultar inoperante, como consecuencia del elevado número de integraciones a realizar si se eleva el número de variables, la forma analítica de P_{τ} puede simplificarse *a priori* para geometrías simples como las tratadas en los capítulos 4 y 5. El objetivo de esta sección es, por consiguiente, extender las conclusiones anteriores al problema (2N)-dimensional

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -v_i \frac{\partial f}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial v_i} \left[D_{vi} + \frac{F_i}{m} - \frac{\partial}{\partial v_i} D_{ij} \right] f(v, x; t) \quad (\text{A.10})$$

que corresponde a una ecuación de Fokker-Planck en las variables $\{q_1 \cdots q_{2N}\} = \{v_1 \cdots v_N, x_1 \cdots x_N\}$, en la que se ha supuesto la fuerza exterior \mathbf{F} independiente de \mathbf{v} . Las componentes del vector de deriva y del tensor de difusión son respectivamente: $D_{x_i} = v_i$; $D'_i = D_{v_i} + F_i/m$, $D_{v_i v_j} = D_{x_i x_j} = 0$. Siguiendo el método presentado en la sección anterior, el operador auxiliar \mathbf{L}_{FP}^* para la resolución de (A.6) es ahora (en notación vectorial)

$$\mathbf{L}_{FP}^* = -\mathbf{v} \cdot \nabla - \nabla_v \cdot [\mathbf{A}' - \nabla_v \cdot \mathcal{D}']$$

El operador ∇_v se refiere al operador gradiente en el espacio de velocidades, el vector \mathbf{A}' coincide con $\mathbf{D}_v + \mathbf{F}/m$ evaluado sobre las variables primadas; \mathcal{D}' es el tensor $N \times N$ de elementos $D_{v_i v_j}$ también particularizado en las variables fuente $\{q'\}$. Al igual que en (A.8) P_τ se expresa con una *distribución normal (2N)-dimensional no degenerada* en la forma

$$P_\tau(\mathbf{v}, \mathbf{r}; \mathbf{v}', \mathbf{r}'|t) = \frac{1}{(2\pi)^N \sqrt{||(\sigma^2)||}} \exp \left[-\frac{1}{2} (\sigma^2)_{ij}^{-1} (q_i - \bar{q}_i)(q_j - \bar{q}_j) \right] \quad (\text{A.7})$$

donde $\bar{q}_k = \int q_k P_\tau d^{2N}q$ y $\sigma_{km}^2 = (q_k - \bar{q}_k)(q_m - \bar{q}_m)$. Tras integrar por partes en la ecuación diferencial auxiliar ² (A.8), las variaciones de \bar{q}_k y σ_{mk}^2 respecto de la nueva variable temporal vienen dadas por

$$\begin{cases} \dot{\bar{v}}_i = D'_i \\ \dot{\bar{x}}_i = \bar{v}_i \\ \dot{\bar{q}}_i(\tau=0) = q'_i; \quad \sigma^2(\tau=0) = 0, \end{cases} \quad \begin{cases} \dot{\sigma}_{v_i v_j}^2 = 2 D'_{ij} \\ \dot{\sigma}_{x_i v_j}^2 = \sigma_{v_i v_j}^2 \\ \dot{\sigma}_{x_i x_j}^2 = \sigma_{x_i v_j}^2 + \sigma_{x_j v_i}^2 \end{cases}$$

que, una vez integradas, conducen a

$$\begin{cases} \bar{v}_i = v'_i + D'_i \tau \\ \bar{x}_i = x'_i + v'_i \tau + \frac{1}{2} D'_i \tau^2 \end{cases} \quad \begin{cases} \sigma_{v_i v_j}^2 = 2 D'_{ij} \tau \\ \sigma_{x_i v_j}^2 = D'_{ij} \tau^2 \\ \sigma_{x_i x_j}^2 = \frac{2}{3} D'_{ij} \tau^3. \end{cases}$$

Las conclusiones extraídas en la sección anterior, en lo referente a la difusión efectiva en el espacio de posiciones, siguen siendo aplicables al problema general tratado aquí. El tensor \mathcal{D}' dirige los procesos difusivos en todo el espacio de fases ya que la dispersión efectiva sobre las variables $\{x\}$ es proporcional a $D_{ij} \tau^2$. De forma simbólica, la matriz de covarianza (σ^2) y su inversa ($(\sigma^2)^{-1}$) pueden expresar como

$$(\sigma^2) = \begin{pmatrix} 2\tau \mathcal{D}' & \tau^2 \mathcal{D}' \\ \tau^2 \mathcal{D}' & \frac{2}{3} \tau^3 \mathcal{D}' \end{pmatrix} \quad (\sigma^2)^{-1} = \begin{pmatrix} 2\tau^{-1} \mathcal{D}'^{-1} & -3\tau^{-2} \mathcal{D}'^{-1} \\ -3\tau^{-2} \mathcal{D}'^{-1} & 6\tau^{-3} \mathcal{D}'^{-1} \end{pmatrix}$$

Las relaciones anteriores, junto con la expresión del determinante de (σ^2)

$$||(\sigma^2)|| = \frac{1}{||(\sigma^2)^{-1}||} = \frac{\tau^{4N} D_i^2}{3^N},$$

configuran la forma definitiva de P_τ que, a su vez, puede contemplarse como producto de dos distribuciones N-dimensionales P_V y P_R según

$$P_\tau = P_V(\mathbf{v}, \mathbf{v}'|r') P_R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'|v_M) = \frac{1}{2} (\mathbf{v} + \mathbf{v}') \quad (\text{A.8})$$

²en general, el valor medio de cualquier función $h(q, t)$, se obtendrá como

$$\frac{d}{dt} \bar{h}(q'|t) = \frac{\partial h}{\partial t} + D_{q_i} \frac{\partial h}{\partial q_i} + D_{q_i q_j} \frac{\partial^2 h}{\partial q_i \partial q_j}$$

donde

$$P_V = \frac{1}{\sqrt{(4\pi\tau)^N D_t}} \exp\left[-\frac{1}{4\tau} D'_{ij}{}^{-1} V_i V_j\right]; \quad V_k = v_k - v'_k - D'_k \tau,$$

$$P_r = \sqrt{\left(\frac{3}{\pi\tau^3}\right)^N \frac{1}{D_t}} \exp\left[-\frac{3}{\tau^3} D'_{ij}{}^{-1} Z_i Z_j\right]; \quad Z_k = x_k - x'_k - v_{Mk} \tau.$$

Debe notarse que P_V depende de r' a través de F' y que ésta a su vez puede incluso depender de la velocidad. La factorización de P_r como producto de probabilidades de transición en los subespacios de posiciones y momentos, ofrece la opción de atacar primeramente el problema en el espacio de velocidades en situaciones de geometría prefijadas, cambiando P_V por los propagadores dados en los capítulos anteriores. Las variables $\{r\}$ del espacio real pueden referirse a las componentes del vector de posición r sobre las direcciones ortogonales del vector velocidad en coordenadas curvilíneas.

A.3 Aplicación al movimiento browniano.

Como aplicación de la probabilidad de transición (A.12), más concretamente de (A.8), a la solución numérica integral de la ecuación de Fokker-Planck en la forma (A.10) se ha estudiado la evolución de la distribución $f(v, x; t)$ de una población de partículas en movimiento browniano unidimensional sujeta a la fuerza exterior $F(x) = -m\omega^2 x$.

En este caso, la solución estacionaria es la distribución de Boltzmann

$$f_s(v, x) = \mathcal{N} \exp\left[-\frac{\gamma}{2D}(v^2 + 2V(x))\right], \quad (v, x) \in \mathcal{R}^2,$$

donde \mathcal{N} es el factor de normalización y $V(x) = \omega^2 x^2/2$ es el potencial del que se deriva $F(x)$. El procedimiento de integración es similar al presentado en el quinto capítulo para la ecuación integral de Fokker-Planck en la Física del Plasma. Los elementos $Q_{ij}{}^{i'j'} = Q_{II'}$ de la matriz de evolución Q se determinan a partir de la expresión (A.8) particularizada en los puntos (x_i, v_j) y $(x_{i'}, v_{j'})$ de la red espacial homogénea que se ha utilizado a lo largo de la exposición.³ Si P_r se factoriza en la forma (A.12) cada una de las distribuciones formales P_v y P_x pueden archivarse en memoria como funciones de tres índices en la primera iteración. El número de sumas en cada paso temporal se reduce notablemente si se recurre a un cálculo estimativo del alcance sobre la red de los procesos convectivo-difusivos, mediante el algoritmo habitual inspirado en el análisis de las elipses de equiprobabilidad, como se mostró en el capítulo final. Es interesante señalar que la preferencia de usar un paso temporal τ relativamente grande es ahora más patente, ya que P_x depende de $\Delta'\tau = \tau^3$ reemplazando a τ en la probabilidad de transición habitual (2.13) del espacio de velocidades. Los criterios para la aplicación de la integración numérica simple por rectángulos, dados en el capítulo segundo, se aplican igualmente sobre el espacio de posiciones para $\Delta'\tau$ y Δx . Si $\Delta'\tau$ es del orden de $(\Delta x)^2$ la ecuación de evolución para f_{ij}^{n+1} en términos de $Q_{II'}$ puede sustituirse por la expresión más simple (A.9) como buena aproximación.

Las figuras de A.1 siguientes muestran la evolución de la condición inicial f_0 tipo "histograma" hasta la distribución numérica gaussiana f_s esperada para $\gamma = D = \omega = 1$, con los parámetros característicos de red anotados en los comentarios.

³Se trata pues de una retícula en el plano XV con celdilla unidad $\Delta x \times \Delta v$ similar a la utilizada en el último capítulo.

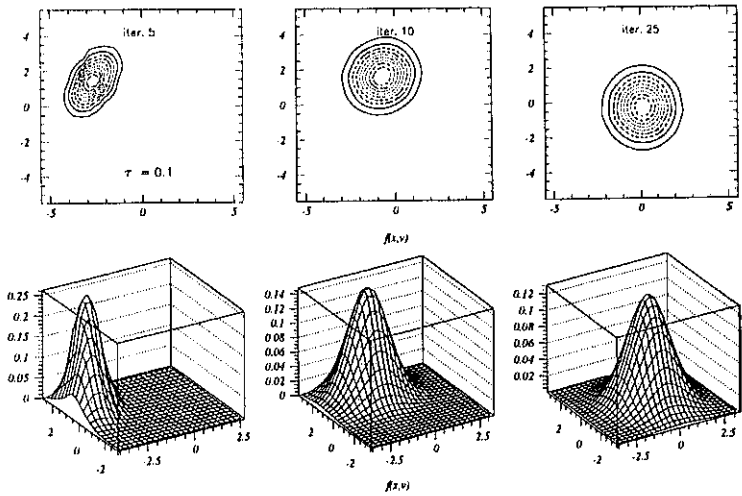


Figura A.1: Movimiento browniano.

Movimiento browniano en el espacio X-V. Superficies de nivel y superficies de la distribución. solución estacionaria es una maxwelliana. Los parámetros de la discetización son: $\tau = 0,1$, $\Delta x = \Delta v = 0,125$ sobre una red uniforme 40×80 .