

*Algunas propiedades de los estados
estacionarios de sistemas disipativos
sencillos*

TESIS DOCTORAL

por

Antonio Lasanta Becerra

Programa de doctorado en Física y Matemáticas

Universidad de Granada

5 Febrero 2014

Editor: Editorial de la Universidad de Granada
Autor: Antonio Lasanta Becerra
D.L.: GR 1853-2014
ISBN: 978-84-9083-036-9

Tesis doctoral dirigida por:

Dr. Antonio Prados Montaña

Dr. Pablo Ignacio Hurtado Fernández

El doctorando Antonio Lasanta Becerra y los directores de la tesis Antonio Prados Montaña y Pablo Ignacio Hurtado Fernández. Garantizamos, al firmar esta tesis doctoral, que el trabajo ha sido realizado por el doctorando bajo la dirección de los directores de la tesis y hasta donde nuestro conocimiento alcanza, en la realización del trabajo, se han respetado los derechos de otros autores a ser citados, cuando se han utilizado sus resultados o publicaciones.

Granada, 5 de febrero de 2014

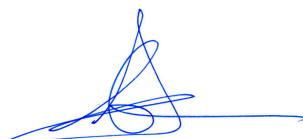


Fdo.: Antonio Prados Montaña



Fdo.: Pablo Ignacio Hurtado Fernández

Memoria presentada por Antonio Lasanta Becerra para optar al Grado de Doctor en Física por la Universidad de Granada.



Fdo.: Antonio Lasanta Becerra

*Camerado! This is no book;
Who touches this, touches a man.*
Walt Whitman

A Loli, Ana y Antonio,
sin los cuales esto nunca habría sido posible.

Agradecimientos

Siempre he sido un sentimental, por lo tanto este momento de escribir los agradecimientos me parece el más emocionante y que más cuidado requiere. A tantas y tantas personas sin las que sin ninguna duda nunca habría sido posible esta tesis.

En primer lugar quiero dar las gracias a mis directores tesis, Antonio Prados y Pablo Hurtado. Antonio me ha acompañado incesantemente desde que aparecí en Sevilla, de hecho además de la relación director-doctorando ha surgido una buena amistad en la que tantos desayunos, cenas y almuerzos hemos compartido. Me ha apoyado y ha dado la cara por mí en todo los malos momentos que me he pasado durante estos años. También quiero agradecer su paciencia para resolver todas mis dudas una y otra vez y querer compartir conmigo su amplio conocimiento de la Mecánica Estadística. A Pablo Hurtado quiero agradecer su apoyo, positividad, entusiasmo y capacidad de trabajo. Es de esas personas que irradian positividad, generan confianza a su alrededor y siempre tienen una palabra de ánimo para los demás. Gracias además por tener la paciencia de explicarme una y otra vez el dichoso “método de los clones”.

Quiero agradecer también especialmente a Javier Brey la confianza depositada en mí al concederme la beca FPI con la que he podido realizar esta tesis y por aportarme su visión tranquila y reposada de la física.

A los miembros de mi grupo. A María José, por haberme dedicado su tiempo mientras estuve aprendiendo dinámica molecular. A Maribel, Pablo y Pedrito (que los tres son uno) por las charlas sobre “mis bolas”, programación, teoría cinética y de diversos temas que hemos compartido. A Álvaro por aportarme siempre serenidad, su punto de vista sosegado sobre las cosas, y su visión de la física desde una perspectiva siempre diferente. Y a Nagi por los consejos, paseos y los tés que compartimos aquellas madrugadas de 2010. A Vicente, mi compañero de despacho por nuestro “festival del humor” particular. A Paco, porque aunque fuimos poco tiempo compañeros de despacho, hemos forjado una buena amistad y siempre ha estado ahí para darme un consejo apropiado, sincero y cariñoso. A Marina, Carmen e Isabel por haber tenido la paciencia de aguantar las llamadas y los mensajes que tanto tiempo han ocupado a Antonio.

A los que me han acompañado y soportado estos años de fatigas en Sevilla, Galván, Nieves, Lidia, Ezi, Armando, Manolo y Carmen. Y a los Jose Luis, el de arriba y el de abajo.

A los que me vienen aguantando desde Granada, Jose “Proteus”, Jesús, Alex, Bea, Rosa, Lidia, Raquel, Pablo y Carlos. Especialmente a Jorge por tantas noches de pizza, física y cine que tuvimos, y a Dani por tantos ánimos, charlas de física, y días de escalada que hemos compartido. A todos ellos por nuestras “frikedadas”.

Mención aparte merece Sheila que ha sido el nexo de unión entre los dos mundos y siempre ha tenido un rato, un consejo, acompañados de una sonrisa para mi, y por compartir tantos desayunos y almuerzo conmigo.

A mis tías Maruja y Paca, que me han hecho la vida mucho más sencilla durante estos años y siempre me han recibido con una sonrisa sin ningún “pero” día tras día.

A mis amigos de siempre, Fran que siempre ha estado ahí y confiando en mi, Damián con el que tantas y tantas horas he compartido, Pinilla con quien conviví y lo pasamos tan bien en Granada y a Juan Ramón, Caterina y Alma que siempre han confiado en mi.

A Jose, Miri y Judas por las tardes de entreno y ratos que hemos compartido dentro y fuera de las carreras.

A mi familia de Ceuta, Carlos, Gloria y Manuel que me han hecho siempre sentir como en casa. Y a Carmen por tanta tortillas de patatas y tartas que me han alimentado durante estos años. Y por supuesto a Nieves, de la que sé, que siempre ha confiado en que podría lograrlo.

A mis tíos, Carlos, Jose, Ada, Mabel y Sara. A mis primos Libe, Chema, Emilio, Marina, Carlitos chico y Carlitos grande con el que no pocos filetes con patatas me he comido.

A los profesores que durante la carrera me marcaron de alguna u otra forma. Alfonso Salinas, quien siempre me apoyó y sin el que no podría haber terminado la carrera. A Mar Bastero con quien dí mis primeros pasos en la investigación y de quien aprendí que ser físico no era algo imposible. A Bert Janssen que me animó a dedicarme a la ciencia. A Paco de los Santos y Pedro Garrido por haberme motivado tanto con sus clases.

Y por supuesto a aquellos que se fueron pero siempre tengo presentes, Diego, Manolito y Curro del que nunca me pude despedir.

A mi madre porque siempre ha hecho lo imposible para que yo pudiese estar aquí y por todos los años complicados que hemos superado juntos. A mi padre por siempre aportarme esa tranquilidad y darme esa confianza que me ha hecho creer en mi mismo.

A Loli por que realmente sin su ánimo no habría conseguido la beca, ni habría terminado la carrera, ni habría tenido la paciencia de superar tantos baches que se me han presentado en el camino. Por la “espaldita”, y tantas horas y horas que hemos pasado hablando sobre aquellas cosas que me preocupaban. Por su apoyo incondicional, por su confianza y por su paciencia. Y sobre todo por aceptarme como soy.

Índice general

Publicaciones del autor	1
I Memoria	3
1. Introducción	5
1.1. Sobre fluctuaciones y curiosidades, con algo de historia	6
2. Teoría de las grandes desviaciones y mecánica estadística	11
2.1. De los sistemas en equilibrio a los sistemas fuera del equilibrio . . .	12
2.1.1. Sistemas en equilibrio	12
2.1.2. Sistemas fuera del equilibrio	17
2.1.3. Sistemas en equilibrio frente a sistemas fuera del equilibrio .	19
2.2. Elementos de la teoría de las grandes desviaciones	21
2.2.1. Resultados generales	21
2.2.2. Grandes desviaciones en equilibrio	24
2.2.3. Grandes desviaciones fuera del equilibrio	28
2.3. Estadística de la corriente en sistemas conservativos difusivos fuera del equilibrio	31
2.3.1. Teoría de las fluctuaciones macroscópicas	31
2.3.1.1. Termodinámica de las corrientes	34
2.3.2. Aditividad de las fluctuaciones de la corriente	36
2.3.3. El modelo KMP en el caso conservativo	38
3. Una clase general de modelos disipativos	43
3.1. Definición de los modelos	45
3.1.1. Modelo microscópico	45
3.2. Límite continuo (Hidrodinámica)	47
3.2.1. Aproximación de equilibrio local	50
3.3. Ecuaciones de los promedios. Soluciones analíticas y numéricas . . .	57
4. Hidrodinámica fluctuante	69
4.1. Definición de los ruidos	70
4.1.1. La corriente fluctuante. Valores promedio y propiedades del ruido.	70
4.1.2. Carácter gaussiano del ruido de la corriente	73

4.1.3. La disipación fluctuante. Valores promedio y propiedades del ruido.	74
4.2. Resultados. Comparación teoría simulación.	78
5. Fluctuaciones raras y típicas en un sistema difusivo con disipación e inyección de energía	81
5.1. Teoría de las fluctuaciones macroscópicas para sistemas disipativos .	81
5.2. Análisis de la función de grandes desviaciones en algunos casos límite	89
5.2.1. Fluctuaciones pequeñas alrededor del promedio	89
5.2.2. Sistemas débilmente disipativos $\nu \ll 1$	90
5.2.3. Sistemas fuertemente disipativos $\nu \gg 1$	97
5.3. Grandes desviaciones de la energía disipada	99
5.3.1. Comportamiento gaussiano y fluctuaciones típicas	100
5.3.2. Espectro completo de las fluctuaciones de la disipación integrada	104
5.3.2.1. Sistemas débilmente disipativos $\nu \ll 1$	105
5.3.2.2. Sistemas con coeficiente de disipación arbitraria ν .	111
6. Conclusiones	115
II Apéndices	119
A. Propiedades de los cumulantes del ruido de la disipación	121
B. El problema variacional para un Lagrangiano con derivadas segundas	123
C. El problema variacional con restricciones	127
D. Traslación de las restricciones a las condiciones de contorno	129
E. Formulación hamiltoniana del problema	133
F. Simulación de Monte Carlo de eventos raros: Evaluación directa de la función de grandes desviaciones	137
Bibliografía	142
Lista de Figuras	146

Publicaciones del autor

A. Prados, A. Lasanta and P. I. Hurtado. *Large Fluctuations in Driven Dissipative Media*. Physical Review Letters 107, 140601 (2011).

A. Prados, A. Lasanta and P. I. Hurtado. *Nonlinear driven diffusive systems with dissipation: Fluctuating hydrodynamics*. Physical Review E 86, 031134 (2012).

P. I. Hurtado, A. Lasanta and A. Prados. *Typical and rare fluctuations in nonlinear driven diffusive systems with dissipation*. Physical Review E 88, 022110 (2013).

Parte I

Memoria

Capítulo 1

Introducción

La construcción de modelos en la ciencia, y concretamente en física, para representar la naturaleza y hacer más sencillo y comprensible su estudio data de muy antiguo: por ejemplo, en el siglo II d.C. Claudio Ptolomeo desarrolló el modelo geocéntrico para el universo. La mecánica estadística es la parte de la física que trata de entender las propiedades macroscópicas de los sistemas físicos compuestos por muchas partículas, a partir del análisis de la dinámica *microscópica* de sus constituyentes elementales. La complejidad de las interacciones existentes en los sistemas macroscópicos, hace aún si cabe más necesario el uso de modelos sencillos que permitan la conexión micro-macro típica de la Mecánica Estadística. En muchas ocasiones, se parte de lo que se denomina una descripción *mesoscópica* o de grano grueso, en la que ya se ha integrado sobre ciertos grados de libertad, cuyo efecto se incluye en ciertas componentes estocásticas de la dinámica al nivel mesoscópico. Un ejemplo prototípico es la ecuación de Langevin para el movimiento browniano [1], en que el efecto de las partículas del medio en que está inmersa la partícula browniana se modela mediante una fuerza estocástica. Aunque la dinámica microscópica es reversible, la descripción mesoscópica es típicamente irreversible: independientemente de su configuración inicial, el sistema alcanza el estado de equilibrio termodinámico que le corresponde para tiempos suficientemente grandes. La irreversibilidad del proceso se mide mediante los llamados coeficientes de transporte, en el caso de la partícula browniana el coeficiente de fricción para la partícula browniana en el fluido. En este contexto, se usan a veces indistintamente los términos irreversible y disipativo, de hecho a la relación entre los coeficientes de transporte, medida de la irreversibilidad, y las fluctuaciones del sistema en equilibrio se las conoce como relaciones de fluctuación–disipación.

En esta memoria vamos a investigar el comportamiento de sistemas disipativos, pero con un matiz en el uso de este término. A lo largo de este trabajo, un sistema disipativo es un sistema físico cuya dinámica microscópica no es reversible. Un ejemplo típico son los medios granulares: debido a que las colisiones entre granos son inelásticas, la dinámica microscópica es irreversible: si no hay algún mecanismo externo de inyección de energía, todos los granos terminan en reposo en el límite de tiempos grandes. Esto introduce un elemento adicional de complejidad en la descripción mesoscópica, ya que algunos resultados bien establecidos (por ejemplo, la llamada condición de balance detallado) son consecuencia de la reversibilidad de la dinámica microscópica. Se hace por tanto indispensable utilizar modelos sencillos y tratables analíticamente de los sistemas que queremos estudiar. Por supuesto, estos modelos deben incluir los ingredientes principales de muchos de los sistemas disipativos, en el sentido anteriormente dicho, presentes en la naturaleza: (i) disipación en la dinámica microscópica, (ii) un mecanismo de difusión no lineal y (iii) un mecanismo externo de inyección de energía que lleva al sistema a alcanzar un estado estacionario en el límite de tiempos grandes. De nuevo, un ejemplo prototípico son los medios granulares, pero debemos insistir en que nuestra idea no es tratar de abordar el problema “realista”, sino una clase general de modelos muy simplificados que, reteniendo los ingredientes fundamentales (i), (ii) y (iii), permita un tratamiento analítico.

1.1. Sobre fluctuaciones y curiosidades, con algo de historia

“El científico no estudia la naturaleza por la utilidad que le pueda reportar; la estudia por el gozo que le proporciona, y este gozo se debe a la belleza que hay en ella. ... La belleza intelectual se basta a sí misma, y es por ella, más que quizá por el bien futuro de la humanidad, por lo que el científico consagra su vida a un trabajo largo y difícil.” Henri Poincaré

En la ciencia, pequeñas cuestiones en apariencia secundarias, se han convertido en el inicio de grandes innovaciones del pensamiento. En 1827, el botánico escocés Robert Brown observó un fenómeno al microscopio que le llamó la atención. Los granos de polen suspendidos en el agua se desplazaban en zigzag por el medio. En principio, se pensó que ésta era una actividad peculiar de las células masculinas de las plantas. Durante décadas, este fenómeno fue considerado algo que no pasaba de ser una mera curiosidad. Entonces comenzó a atraer la atención de científicos

importantes como Poincaré. A finales del siglo XIX y principios del siglo XX, a pesar del éxito en determinadas áreas, como la química y la teoría cinética, la hipótesis atomística no estaba totalmente aceptada. Algunos científicos reputados como Oswald y Mach esperaban poder evitar tales hipótesis para una descripción completa de la naturaleza; según Mach “La teoría atómica juega un papel similar en la física a ciertos conceptos auxiliares en matemáticas; es un modelo matemático para facilitar la reproducción mental de los hechos.” Ésta es una de las razones por las que Einstein y Smoluchowski se interesaron por la mecánica estadística: encontrar evidencias de la veracidad de la hipótesis atomística. En cuanto al concepto de fluctuación, ya era conocido por Gibbs y Boltzmann, que indicaron que la desviación cuadrática media de la energía sería muy pequeña para ser observada en los sistemas macroscópicos. Citamos textualmente [2]: “En la teoría molecular asumimos que las leyes que rigen los fenómenos encontrados en la naturaleza no se desvían esencialmente de los límites a los que se aproximarían en el caso de un número infinito de moléculas infinitamente pequeñas” “(las fluctuaciones) deberían ser en general cantidades despreciables, puesto que tal fenómeno no debe ser suficientemente grande para explicar las desviaciones más considerables respecto de los valores medios.” [3] Los trabajos independientes y pioneros de Einstein [1, 4] y Smoluchowski [5] resolvieron este problema. Su aportación genial y novedosa fue considerar el papel central de las fluctuaciones como reflejo de la hipótesis atomística: “La ecuación obtenida finalmente llevaría a determinar el valor de la constante universal N_A (número de Avogadro), si fuese posible determinar el valor cuadrático medio de las fluctuaciones de la energía del sistema . . .” [1].

Einstein, en su artículo revolucionario de 1905 considera el movimiento de pequeñas partículas de tamaño visibles al microscopio, las partículas *brownianas*, suspendidas en un líquido. Estudia su comportamiento basándose en la “teoría cinética molecular del calor”: el movimiento de las partículas brownianas es aleatorio como consecuencia de su interacción con los átomos del fluido en el que está inmerso. Así, obtiene la expresión

$$\sqrt{\overline{x^2}} = \sqrt{2Dt}. \quad (1.1)$$

Esta expresión relaciona desplazamiento cuadrático medio $\overline{x^2}$ de la partícula browniana con su coeficiente de difusión D , que a su vez es función del número de Avogadro

$$D = \frac{RT}{N_A} \frac{1}{6\pi kP}, \quad (1.2)$$

siendo k la viscosidad del fluido, P el radio de la partícula y R la constante de los

gases. Las expresiones (1.1) y (1.2) permiten el cálculo del número de Avogadro a partir de la medida del desplazamiento cuadrático medio de la partícula browniana, lo que hizo posible la verificación experimental de la hipótesis atomística.

Dada la importancia del estudio de las fluctuaciones, Lev Landau generalizó el concepto de fluctuaciones de las magnitudes termodinámicas en torno al equilibrio [6]. Consideremos cierta cantidad física x , Landau argumentó que la probabilidad de encontrar al sistema con un valor de esta cantidad entre x y $x + dx$ debe ser proporcional a $e^{S(x)}$, donde $S(x)$ es la entropía considerada formalmente como función del valor exacto de x .¹ Usando la notación $P(x)dx$ para esta probabilidad, puede escribirse que

$$P(x) \propto e^{\Delta S(x)}, \quad (1.3)$$

donde $\Delta S(x)$ es la variación de entropía en la fluctuación. En lo que sigue, admitimos que x tiene valor medio nulo en el equilibrio o, alternativamente, redefinimos x haciendo que $x \rightarrow x - \bar{x}$. Si la cantidad en la que varía x es muy pequeña en una fluctuación dada, podemos desarrollar $\Delta S(x)$ en serie de potencias alrededor del valor de equilibrio $x = 0$,

$$\Delta S(x) = -\frac{\gamma}{2}x^2, \quad \gamma = S''(x)|_{\text{eq}} > 0. \quad (1.4)$$

La constante γ una constante positiva, ya que la entropía S tiene un máximo en el equilibrio. Normalizando la probabilidad, tenemos que

$$P(x) = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi}} e^{-\gamma x^2/2} \quad (1.5)$$

Este es un resultado general importante: las fluctuaciones pequeñas de una magnitud en torno a su valor de equilibrio están distribuidas de manera gaussiana. La varianza de x está dada por

$$\overline{(\Delta x)^2} = \gamma^{-1}. \quad (1.6)$$

Como la entropía es extensiva, si x es una magnitud intensiva se tendrá que γ es extensiva, proporcional al número de partículas en el sistema. En consecuencia, la desviación cuadrática media verificará que $\sqrt{\overline{(\Delta x)^2}} \propto N^{-1/2}$, que es el escalamiento típico de las fluctuaciones de las magnitudes intensivas en un sistema macroscópico.

¹La idea física es relativamente sencilla, ya que $e^{S(x)}$ es proporcional al número de microestados accesibles al sistema para ese valor de x .

El esquema anterior es fácilmente generalizable a la fluctuación simultánea de varias magnitudes termodinámicas. Lo que se obtiene en general para un conjunto de variables x_i , $i = 1, n$, es una distribución gaussiana para esas n variables,

$$P(x) \propto \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n \gamma_{ij} x_i x_j\right), \quad (1.7)$$

donde γ_{ij} son los elementos de una forma cuadrática definida positiva,

$$\gamma_{ij} = \left. \frac{\partial^2 S}{\partial x_i \partial x_j} \right|_{\text{eq}}. \quad (1.8)$$

Hemos admitido también, sin pérdida de generalidad, que todas las x_i tienen valor medio nulo. Por ejemplo, para la temperatura T y el volumen V se obtiene que [6]

$$P(x) \propto e^{-\frac{C_v}{2T^2} (\Delta T)^2 + \frac{1}{2T} \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T (\Delta V)^2}. \quad (1.9)$$

Así, las expresiones para las varianzas de las fluctuaciones de la temperatura T y el volumen V son

$$\overline{(\Delta T)^2} = \frac{T^2}{C_v}, \quad (1.10a)$$

$$\overline{(\Delta V)^2} = -T \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T. \quad (1.10b)$$

En las expresiones anteriores, se han usado unidades tales que la constante de Boltzmann $k_B = R/N_A = 1$, C_v es la capacidad calorífica (extensiva) a volumen constante y P es la presión. Hemos usado la notación habitual en termodinámica, indicando con un subíndice la variable que es constante al tomar la derivada parcial. Las fluctuaciones pequeñas de temperatura y volumen son independientes, ya que $\overline{\Delta T \Delta V} = 0$, y no correlación implica independencia estadística para una distribución gaussiana. Obsérvese también que como la temperatura es una variable intensiva, se tiene que $\sqrt{\overline{(\Delta T)^2}}$ escala como $N^{-1/2}$, ya que C_v es extensiva. Sin embargo, para el volumen $\sqrt{\overline{(\Delta V)^2}}$ escala como $N^{1/2}$. Esto no es extraño, ya que V es extensiva y para encontrar el escalamiento habitual, como $N^{-1/2}$, hay que considerar una cantidad extensiva, por ejemplo, el volumen específico V/N . Así, vemos que la concentración de la probabilidad en un sistema macroscópico, en una estrecha franja alrededor del valor medio, está bien definida matemáticamente para las magnitudes intensivas.

En el siguiente capítulo de esta tesis, veremos como pueden generalizarse algunas

de estas ideas a una situación arbitrariamente lejos del equilibrio, utilizando las herramientas de la teoría de las grandes desviaciones.

Capítulo 2

Teoría de las grandes desviaciones y mecánica estadística

A lo largo de los últimos 30 años, se ha utilizado la teoría de las grandes desviaciones (large deviation theory, LDT) para tratar de establecer los fundamentos matemáticos de la mecánica estadística de equilibrio de manera rigurosa. En este contexto, la LDT aparece como la teoría matemática “natural” para abordar la mecánica estadística. Más recientemente, un enfoque análogo se ha desarrollado para los sistemas fuera del equilibrio. En este capítulo mostramos las bases de dicho enfoque de una manera intuitiva, resaltando las diferencias y similitudes de la LDT para el estudio de ambos tipos de situaciones físicas, esto es, de equilibrio y no-equilibrio. A lo largo del mismo, usaremos repetidamente algunos conceptos. Por ejemplo, las ideas de *hidrodinámica*, *macroscópico*, *límite termodinámico*, y *límite de tiempos grandes* son completamente análogas a las usadas en la bibliografía propia de la mecánica estadística, mientras que otras como la noción de *colectividad estadística* necesitan ser generalizadas para los sistemas fuera del equilibrio.

Recientemente, han comenzado a estudiarse los sistemas físicos fuera del equilibrio (SFE) con los métodos de la teoría matemática de las grandes desviaciones, desarrollados en las décadas de los 60 y 70 por Donsker y Varadhan, y Fridlin y Wentzell [7–9]. En estos estudios de SFE [9–11], su dinámica se modela a nivel mesoscópico como un proceso de Markov con tiempo continuo o discreto, y se analiza típicamente el estado estacionario de no equilibrio cuando se inyecta energía (o partículas, etc.). Para la descripción estadística de estos estados, son necesarios los conceptos centrales de la teoría de grandes desviaciones, como el principio de

grandes desviaciones (*large deviation principle*, LDP), la función de tasa o ritmo (*rate function*, RF), la función generatriz, etc. Esto no es tan sorprendente, puesto que la LDT ya se había utilizado con éxito como el marco matemático “natural” para la mecánica estadística de equilibrio durante más de 30 años [9, 12–14]. Sin embargo, hay más, en ambos escenarios se comparten muchas ideas, conceptos e incluso la estructura teórica, que encuentra un reflejo claro y concreto en el lenguaje de las grandes desviaciones, que puede considerarse el marco matemático “natural” de ambas teorías.

Centrándonos primero en la mecánica estadística de equilibrio desde el punto de vista de la LDT, adquiere un sentido claro, por ejemplo, la conexión mediante una transformada de Legendre de la entropía y la energía libre, así como la validez de dicha transformación. Asimismo, dentro del marco de la LDT, se entiende la relación entre las nociones de concentración de la probabilidad y tipicidad de un estado, y las conexiones con principios variacionales como el principio de máxima entropía o el de mínima energía. Es natural entonces comenzar con un repaso de los conceptos esenciales en la mecánica estadística de los sistemas en equilibrio, estableciendo analogías con los SFE cuando sea pertinente. En la sección 2.2, expresaremos estos conceptos en el lenguaje de la LDT para definirlos de forma precisa en este marco matemático, a fin de enfatizar la estructura teórica subyacente en la mecánica estadística tanto de los SE como de los SFE.

2.1. De los sistemas en equilibrio a los sistemas fuera del equilibrio

Antes de discutir cómo los conceptos de las grandes desviaciones aparecen en la mecánica estadística de equilibrio y no-equilibrio, repasaremos la base de cada teoría y enfatizaremos los conceptos compartidos por ambas. En este sentido, es importante tener en la mente el concepto de *tipicidad*, que está conectado matemáticamente con la Ley de los Grandes Números y la concentración de las distribuciones de probabilidad.

2.1.1. Sistemas en equilibrio

El objetivo de la mecánica estadística de equilibrio, como es bien sabido, es explicar y predecir cómo emergen los estados macroscópicos de equilibrio de sistemas

compuestos de muchas partículas, a partir de una descripción probabilística de los estados microscópicos compatibles con el macroestado. Los estados de equilibrio tienen ciertas características fundamentales, que podríamos resumir en las siguientes: (i) son estados estacionarios en el tiempo, (ii) son estables frente a pequeñas perturbaciones y (iii) se describen mediante unas pocas variables. Este último punto es fundamental: para un sistema con un gran número N de constituyentes elementales (partículas, moléculas, ...), la dimensionalidad del espacio de las variables relevantes es proporcional a N en la descripción microscópica (típicamente: dimensión del espacio de las fases) mientras que es independiente de N en la macroscópica (típicamente: presión, volumen, energía, ...).

Vamos a comenzar repasando cómo se modelan matemáticamente los estados de equilibrio en mecánica estadística. Por simplicidad y concreción, haremos la presentación del caso clásico. Consideremos un sistema de N partículas, y denotemos mediante $w = \{w_1, w_2, \dots, w_N\}$ cada configuración microscópica o *microestado* del sistema, donde w_i es el estado de la i -ésima partícula. Típicamente, w_i contendrá la posición y velocidad de la partícula i , pero la elección de variables canónicas no es única. Para estudiar las propiedades de este sistema en equilibrio, se introduce una distribución de probabilidad a priori $P(w)$. Esta distribución de probabilidades se interpreta como la distribución estacionaria de la ecuación que determina la evolución de la distribución de probabilidades a partir de la dinámica microscópica, típicamente la ecuación de Liouville en el caso clásico. Si introducimos la notación Λ para el espacio de estados de una única partícula, tendremos que $P(w)$ es una distribución de probabilidad en el espacio de las N partículas $\Lambda_N = \Lambda^N$.

Ahora, consideramos un cierto *macroestado* M_N , que está definido matemáticamente a partir de una función $M_N(w)$ de los microestados. Por ejemplo, $M_N(w)$ puede ser la energía o la magnetización correspondientes al microestado w considerado. La probabilidad de que esta variable aleatoria M_N adopte cierto valor m , $P(M_N = m)$, puede calcularse a partir de la distribución a priori $P(w)$: es igual a la suma de $P(w)$ sobre todos los microestados compatibles con el valor macroscópico considerado m , esto es,

$$P(M_N = m) = \int_{w \in \Lambda_N: M_N(w)=m} dw P(w) = \int_{w \in \Lambda_N} dw P(w) \delta(M_N(w) - m). \quad (2.1)$$

Si $P(w)$ es una distribución válida para un SE y el macroestado M_N se elige de manera apropiada, se observará que $P(M_N)$ se concentra alrededor de ciertos valores altamente probables y que esta concentración se hace más pronunciada cuanto mayor es N . Estos serán los valores *de concentración* o *más probables* de

M_n que llamamos puntos o valores o estados de equilibrio de M_N . Por supuesto, $P(M_N = m)$ está bien normalizada: si integramos sobre todos los posibles valores de m ,

$$\int_{\forall m} dm P(M_N = m) = \int_{w \in \Lambda_N} dw P(w) = 1, \quad (2.2)$$

ya que la integral de la delta de Dirac en (2.1) es igual a uno, $\int_{\forall m} dm \delta(M_n(w) - m) = 1$.

Matemáticamente, la concentración de $P(M_N)$ es similar a la Ley de los Grandes Números, en el sentido de que existe un conjunto B de valores de M_N tales que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P(M_N \in B) = 1, \quad \text{y} \quad \lim_{N \rightarrow \infty} P(M_N \notin B) = 0 \quad (2.3)$$

El conjunto B es el conjunto de valores de equilibrio de M_N , o el conjunto de estados de equilibrio del sistema para la variable macroscópica M_N que estamos considerando. Como veremos en la próxima sección, una propiedad esencial de la concentración de $P(M_N)$ en B es que es exponencial como función de N o, más en general, como función del volumen del sistema. Dicho de otro modo, lo que esto significa es que la probabilidad de que M_N sea igual a un valor distinto de uno de sus valores de equilibrio (en B) se anula exponencialmente con el tamaño del sistema. En la física, las posibles separaciones del valor de una magnitud física respecto a su valor de equilibrio se conocen como *fluctuaciones*. De esta forma, podemos afirmar que la probabilidad de que el valor de la magnitud macroscópica M_N fluctúe alrededor de sus estados de equilibrio es exponencialmente pequeña en un sistema de tamaño grande, $N \gg 1$.

La concentración exponencial de $P(M_N)$ explica por qué la LDT se utiliza en la mecánica estadística de equilibrio. A un nivel más físico, es también la razón por la que los estados de equilibrio corresponden a valores *típicos* de M_N y no, como usualmente se dice, a valores *promedios* de M_N . La propiedad fundamental de los estados de equilibrio es que las fluctuaciones alrededor de los mismos son altamente improbables en un sistema macroscópico, que tiene en consecuencia valores bien definidos de las magnitudes que describen el macroestado considerado. Así, el hecho de que M_N tenga un promedio bien definido no es suficiente: la probabilidad de M_N debe converger a algunos puntos de concentración, en el sentido anteriormente expuesto.

¿Por qué se utilizan habitualmente los valores promedio en mecánica estadística en lugar de los valores típicos, correspondientes a los puntos de concentración de probabilidad?. Una primera razón es que, en el caso más sencillo, en el que M_N

tenga un único punto de concentración, el valor medio es igual al valor más probable. Otro motivo es que, en general, es más sencillo escribir las ecuaciones que satisfacen los valores medios, que se definen como integrales de la distribución de probabilidad, que las que satisfarían los puntos de concentración de la probabilidad, que corresponden a los máximos de la distribución. Sin embargo, el uso de promedios puede llevar a veces a confusión, enmascarando la propiedad esencial de los valores de equilibrio, que no es otra que su correspondencia con los valores en los cuales se concentra la probabilidad. Por consiguiente, en esos casos el enfoque habitual de la mecánica estadística involucra una descripción en términos de los puntos de concentración, aun cuando no se use explícitamente el lenguaje propio de la LDT. Un ejemplo prototípico es una transición de fase de segundo orden. Por encima de la temperatura de transición T_c sólo tenemos un estado de equilibrio, cuya magnetización es nula, en el cual se concentra toda la probabilidad: encontramos el macroestado con $m = 0$ con probabilidad igual a la unidad¹. Por debajo de la temperatura de transición tenemos dos posibles valores de la magnetización, $m \propto \pm(T - T_c)^{1/2}$, la distribución de probabilidades de m tiene dos máximos simétricos, en cada uno de ellos se concentra una probabilidad 1/2. Evidentemente, no tiene sentido una descripción de esta bifurcación tipo “pitchfork” con valores medios: por debajo de la temperatura de transición se sigue teniendo que el valor medio de m es nulo. Los estados de equilibrio son en primer lugar y sobre todo estados *típicos* que surgen del escalamiento característico de las distribuciones de probabilidad en el límite de sistemas de tamaño muy grande. Este límite, en el que se considera un sistema de tamaño muy grande, de manera que la probabilidad del macroestado se concentra en unos pocos puntos, se corresponde con el denominado *límite termodinámico* en mecánica estadística [15, 16].

En este punto clave, es relevante discutir el distinto comportamiento de las variables extensivas e intensivas. El carácter extensivo/intensivo de una magnitud depende de su comportamiento cuando el sistema físico considerado se subdivide en un conjunto de subsistemas, que todos juntos forman el sistema original. Una variable es intensiva cuando su valor es el mismo en el sistema original y en cada uno de los subsistemas que lo componen, su valor es por tanto independiente del tamaño del sistema. Un ejemplo típico es la temperatura. Por otra parte, una variable es extensiva cuando su valor en un sistema macroscópico es igual a la suma de sus valores en los subsistemas que lo componen. El valor de una magnitud extensiva sí depende del tamaño del sistema, es proporcional al mismo. Ejemplos típicos son la energía, el número de partículas, el volumen, etc. El cociente de

¹Usamos el lenguaje magnético por concreción, pero en general hay que sustituir la magnetización por el parámetro de orden que sea físicamente relevante en cada caso.

dos magnitudes extensivas es intensiva: puede usarse este hecho para definir una magnitud extensiva como aquella cuyo valor en un sistema macroscópico es proporcional al número de partículas que componen el sistema o, de modo alternativo, a su volumen. Por ejemplo, la energía total H_N de un sistema de N cuerpos con interacciones de corto alcance no se concentra en el límite termodinámico, simplemente porque la energía es *extensiva*, y su valor típico diverge con N . Como resultado de esto, uno no puede formalmente decir que el sistema tiene una *energía de equilibrio* en el límite termodinámico. En lugar de eso, la manera matemáticamente correcta de definir el macroestado es introducir la magnitud energía por partícula $h_N = H_N/N$, cuya probabilidad sí se concentra en el límite termodinámico en un estado o valor independiente del tamaño del sistema, como corresponde a una magnitud *intensiva*.

Para explicar esto con mayor claridad, vamos a considerar la suma

$$S_N = \sum_{i=1}^N X_i \quad (2.4)$$

de N variables aleatorias independientes e igualmente distribuidas $\{X_1, X_2, \dots, X_N\}$. Si la media $\langle X_1 \rangle = \mu$ de esas variables aleatorias es finita, entonces cuando $N \rightarrow \infty$ la distribución de S_N/N se concentra hacia la media de la forma

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P(|S_N/N - \mu| > \epsilon) = 0 \quad (2.5)$$

para todo $\epsilon > 0$, de acuerdo con la Ley de los Grandes Números. Es importante resaltar que este resultado es equivalente al mostrado en la ecuación (2.3), que es correcto para la suma de las medias S_N/N pero no para la suma S_N : la distribución de $P(S_N)$ no se concentra o, dicho de modo más formal, es “plana”. De hecho, en el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$ puede demostrarse que la distribución de S_N/N^α es plana para todo $\alpha \in (0, 1)$ y se concentra de manera trivial para $\alpha > 1$, en cero. De ahí, que la única normalización de la suma de S_N variables aleatorias con media finita que lleva a un punto de concentración no trivial es S_N/N .

El mismo tipo de esquema es aplicable a los estados de equilibrio. De nuevo, la razón de por qué los estados de equilibrio son estables a nivel macroscópico es que las fluctuaciones alrededor de esos estados son muy improbables y, además, se vuelven más improbables cuanto más grande es el sistema. La forma de darle sentido matemáticamente a esta afirmación es considerar variables aleatorias que tienen la propiedad de concentrarse en el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$. Desde este punto de vista, la energía total H_N no es una buena variable para definir un

“macroestado”, ya que no se concentra en este límite. De manera equivalente a S_N , si en lugar de la variable intensiva H_N/N se considera (i) H_N/\sqrt{N} o (ii) H_N/N^2 , el escalamiento no es el correcto. En el caso (i), la distribución se vuelve plana,² mientras que en el segundo caso la distribución se concentra en el valor cero. Por tanto, tenemos una concentración no trivial sólo para H_N/N , lo que es cierto en general para sistemas con interacciones de corto alcance. Para interacciones de largo alcance, como por ejemplo los sistemas gravitacionales o los de campo medio, el escalamiento “bueno” puede ser diferente, para tener un buen macroestado puede tener que considerarse H_N/N^2 o, de manera general H_N/N^α con $\alpha \geq 2$ [17]. La elección de α dependerá de los detalles del sistema considerado, pero el requerimiento siempre será que la distribución de los macroestados estudiados debe concentrarse no trivialmente en el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$.

2.1.2. Sistemas fuera del equilibrio

El estudio de los SFE es conceptualmente más difícil que en los SE porque estamos interesados en describir no sólo las fluctuaciones en el estado estacionario, sino también las fluctuaciones para un instante arbitrario en la evolución dinámica del sistema o las fluctuaciones de magnitudes integradas en un intervalo de tiempo. Por tanto, además de considerar el número de partículas N del sistema o su volumen V , también es necesario considerar como parámetro el tiempo t . Esto implica que aumenta el número de posibles escalamientos relevantes, que además pueden depender del macroestado u observable estudiado.

Consideraremos aquí SFE cuya dinámica se modela mediante un proceso de Markov. Para simplificar la presentación de estos modelos, asumamos por ahora que el tiempo es discreto. En este caso, el microestado w que representaba antes la configuración de un SE en un instante fijo de tiempo, es ahora una trayectoria completa durante en n pasos de tiempo $\mathbf{w} = \{w_i\}_{i=1}^n$. El hecho de considerar un proceso de Markov nos permite descomponer la distribución de probabilidad a priori $P(\mathbf{w})$,

$$P(\mathbf{w}) = P(w_n|w_{n-1}) \cdots P(w_2|w_1)P(w_1), \quad (2.6)$$

con una distribución inicial $P(w_1)$ y los elementos de la matriz de transición $P(w_i|w_{i-1})$, los cuales, en la mayoría de los casos, se asumen que son independientes del tiempo. Formalmente, esto significa que estamos restringiéndonos a

²Ésta es la variable estocástica que se define para obtener el teorema del límite central, para la cual todos los posibles valores de la variable tienen una probabilidad del orden de la unidad, independiente de N .

procesos de Markov homogéneos en el tiempo, la distribución de un tiempo $P(w_i)$ puede depender explícitamente del tiempo discreto i , mientras que la probabilidad de transición $P(w_i|w_{i-1})$ sólo depende de los valores de la variable estocástica (inicial y final) considerados, pero no del tiempo. A partir de la ecuación (2.6), el proceso de Markov está caracterizado de modo completo. Así, el formalismo abstracto es el mismo que para los sistemas de equilibrio: un sistema está descrito por su microestado \mathbf{w} y su distribución de probabilidades $P(\mathbf{w})$ en el espacio de los microestados. Lo que es nuevo para los SFE es la interpretación de w como una trayectoria en el tiempo del sistema que estamos considerando.

Esta diferencia nos permite considerar varios tipos de observables, que a su vez permiten definir distintos tipos de macroestados. Por ejemplo, se puede considerar un observable $M(w_i)$ para un instante de tiempo fijo o estático, que está completamente determinado por el estado del sistema w_i en el instante de tiempo i considerado. O bien estudiar observables dinámicos que corresponden a integrales sobre un intervalo temporal dado. En nuestro caso de tiempo discreto, estas integrales son sumas sobre un cierto rango del tiempo discreto i , $1 \leq i \leq N$,

$$M_n(\mathbf{w}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(w_i). \quad (2.7)$$

En matemáticas, estas magnitudes se denominan *observables aditivos* o *funcionales aditivos* [9]. Un ejemplo físico puede ser la energía $E(t)$ de un SFE promediada sobre un intervalo de tiempo τ , $\frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt' E(t')$. Otro tipo de observable *dinámico*, conectado con el concepto de las corrientes (de energía, partículas, etc.) que surgen en los SFE es

$$M_n(w) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n-1} f(w_i, w_{i+1}). \quad (2.8)$$

Sea cual sea el observable elegido, el objetivo cuando estudiamos un SFE es calcular la distribución de probabilidad $P(M = m)$ de un observable dado M empezando por una distribución a priori $P(\mathbf{w})$ que caracteriza el proceso de Markov que describe la dinámica de nuestro sistema. Además, tendremos que ver si en algún límite de escalamiento esta distribución se concentra en valores específicos de M . Como hemos dicho antes, el límite de escalamiento a considerar depende del sistema y el observable elegido. Típicamente, puede ser el límite de volumen infinito $N \rightarrow \infty$ para un observable fijado en el tiempo $M(w_i)$, mientras que es el límite de intervalo de tiempo infinito $n \rightarrow \infty$ para un observable aditivo o tipo corriente, o una combinación de estos dos límites si el observable aditivo implica muchas

partículas. Este es el caso para la energía media de un sistema de partículas integrada sobre un intervalo de tiempo τ , que es un observable que consideraremos en esta memoria. También pueden ser relevantes otros límites, por ejemplo, el límite de ruido pequeño en sistemas dinámicos en los que se añade una fuerza estocástica o ruido, el límite de tiempo continuo de sistemas discretos, o el de espacio continuo para sistemas con espacio discreto [9]. Por supuesto, en ciertos sistemas algunos de los límites anteriores pueden ser equivalentes, una vez se tengan en cuenta los detalles de los mismos.

La idea fundamental en los SFE es que esperamos que exista una descripción macroscópica, esto es, que existan ciertos *límites de escalamiento* que den lugar a una concentración de la distribución de probabilidad $P(M)$ similar a la discutida en los sistemas de equilibrio. Este comportamiento típico toma diferentes formas, dependiendo de la naturaleza de M : puede ser una evolución típica de un observable fijado en el tiempo o un valor típico de un observable aditivo que aparezca en el límite de tiempos largos. En el primer caso, a la evolución típica de M se le denomina evolución hidrodinámica o *modo hidrodinámico*, mientras que al segundo, se habla de un *valor o estado estacionario*. Como en el caso de los sistemas de equilibrio, estos modos hidrodinámicos o valores estacionarios surgen matemáticamente a partir de una Ley de los Grandes Números para la variable estocástica que define el macroestado de interés.

2.1.3. Sistemas en equilibrio frente a sistemas fuera del equilibrio

Hasta ahora no hemos intentado distinguir entre SFE y SE de otra manera más precisa que con lo que nos sugiere la distribución de probabilidades relevante en cada caso. Para los SE, tenemos una distribución $P(w)$ que describe una variable aleatoria “estática” w , mientras que para los SFE tenemos una variable aleatoria “dinámica”, es decir, un proceso estocástico \mathbf{w} descrito por la distribución $P(\mathbf{w})$. Pero, ¿qué distingue que un sistema esté en equilibrio o fuera del equilibrio? Evidentemente, si hay evolución temporal de la distribución de un tiempo, $P(w_i = w)$ depende del tiempo i , el sistema está fuera del equilibrio. Pero, ¿y si estamos en un estado estacionario, en el que $P(w_i = w)$ es independiente del tiempo? ¿Cómo distinguir un SE de un SFE? La respuesta a esta pregunta desde un punto de vista físico es que la diferencia entre SE y un SFE es que en el primer caso no hay flujos, de masa, carga, energía, etc., mientras que en el segundo sí los hay. Para responder esta misma pregunta desde un punto de vista matemático, necesitamos considerar

la evolución estocástica en el tiempo de un sistema y estudiar cómo se comporta la distribución a priori $P(\mathbf{w})$ de su trayectoria completa \mathbf{w} cuando se invierte el orden de los tiempos. Para ser más precisos, consideremos una trayectoria en tiempo discreto $\mathbf{w} = \{w_1, w_2, \dots, w_{n-1}, w_n\}$, correspondiente a n pasos de tiempo consecutivos. Definimos la trayectoria inversa en el tiempo \mathbf{w}^R como la trayectoria obtenida a partir de \mathbf{w} al reordenar los estados de \mathbf{w} en orden inverso, es decir, $w^R = w_n, w_{n-1}, \dots, w_2, w_1$. Matemáticamente, se dice que el sistema modelado por $P(w)$ se encuentra en equilibrio si $P(\mathbf{w}) = P(\mathbf{w}^R)$ para todas las posibles trayectorias \mathbf{w} [10]. Lógicamente, si no se satisface esta condición diremos que el sistema está fuera del equilibrio. Esta condición matemática está íntimamente relacionada con las nociones de *reversibilidad* o *balance detallado*, pero aquí está expresada a nivel de trayectorias en lugar de la manera usual con probabilidades de transición. Por lo tanto, en la bibliografía más “matemática” de procesos estocásticos [10] puede encontrarse la afirmación de que la dinámica estocástica de un SE satisface balance detallado, mientras que el de un SFE no lo hace. Esto es, en un SFE tendremos que

$$P(w|w')P_{\text{st}}(w') \neq P(w'|w)P_{\text{st}}(w), \quad (2.9)$$

donde $P_{\text{st}}(w)$ es la distribución de probabilidades estacionaria de la dinámica estocástica. Un ejemplo especialmente sencillo de esta situación aparece en la difusión o camino aleatorio simétrico en una red monodimensional discreta [18]. En ese caso puede verse de modo prácticamente *trivial* que hay soluciones estacionarias de la dinámica estocástica de dos tipos: (i) sin flujo neto de partículas, $J = 0$, en ese caso la distribución estacionaria verifica la condición de balance detallado, y (ii) con flujo neto de partículas, $J \neq 0$, para esa situación la distribución estacionaria no verifica balance detallado.

La razón que hay detrás de esta definición es que las distribuciones a priori de equilibrio, tales como la microcanónica y la canónica, son distribuciones estacionarias de la dinámica estocástica. Usando el lenguaje habitual de la física, las probabilidades de transición verifican balance detallado con la distribución de equilibrio relevante para la situación considerada. Las demostraciones de la condición de balance detallado siempre involucran una referencia a la reversibilidad de la dinámica microscópica del sistema; en un sistema en equilibrio sus fluctuaciones surgen sin dirección “preferente” en el tiempo. Los SFE tienen con frecuencia distribuciones estacionarias similares a las de equilibrio; pero la forma de esas distribuciones es en general mucho más complicada que en equilibrio. Retomando el ejemplo del camino aleatorio simétrico antes mencionado: para el caso de equilibrio, todos los nudos de la red tienen la misma probabilidad, mientras que para el caso de no

equilibrio, la distribución de probabilidades es más compleja, y depende del flujo de partículas J impuesto en el sistema.

2.2. Elementos de la teoría de las grandes desviaciones

En esta sección mostraremos como la LDT expresa la observación de que las distribuciones de probabilidad de las variables que definen los macroestados se concentran *exponencialmente* con algún parametro de escala: número de partículas, volumen, tiempo de integración, intensidad del ruido, etc. Esta concentración exponencial es el origen, para los sistemas de equilibrio, de la aparición de la transformada de Legendre que conecta la entropía y la energía libre, y por tanto, de la estructura de Legendre de la termodinámica. Para los SFE, también da lugar a la transformada de Legendre entre cantidades que son las análogas en no-equilibrio a la entropía y la energía libre en el equilibrio.

2.2.1. Resultados generales

Para explicar las ideas centrales y resultados de la LDT, primero consideremos una variable aleatoria general A_n donde n puede ser el número de partículas, el número de pasos de tiempo, etc. El punto de partida de la LDT es la observación de que la distribución de probabilidad $P(w)$ de A_n decae a cero exponencialmente rápido con n para muchas variables de interés. En general, el decaimiento exponencial no es exacto, pero con frecuencia sucede que es el término dominante en la expresión de $P(A_n)$. En este caso, podemos escribir

$$P(A_n = a) \approx e^{-nI(a)}, \quad (2.10)$$

donde $I(a)$ se denomina función tasa de decaimiento (*rate of decay function*) o simplemente función de tasa (*rate function*). Cuando $P(A_n)$ tiene esta forma, decimos que $P(A_n)$ o A_n satisface un principio de grandes desviaciones (LDP). Para ser más precisos, decimos que $P(A_n)$ o A_n satisfacen un LDP si existe el límite

$$\lim_{n \rightarrow \infty} -\frac{1}{n} \ln P(A_n = a) = I(a), \quad (2.11)$$

que define rigurosamente la función de tasa $I(a)$. El parámetro n en el exponente, cuyo aumento provoca la concentración de la distribución de probabilidades, se llama *velocidad* del LDP [8, 9, 14, 19].

No todas las variables aleatorias satisfacen un LDP, la razón de por qué hay toda una teoría basada en que una variable estocástica satisfaga un LDP es que muchas de las variables aleatorias y procesos estocásticos lo hacen [9]. El objetivo de la LDT, en este contexto, es proporcionar métodos para probar que una variable aleatoria dada o proceso satisface un LDP y para obtener la función de tasa que controla el decaimiento del LDP.

Entre estos métodos, vamos a mencionar dos que son especialmente útiles. El primero es conocido como el *Teorema de Gärtner-Ellis* [14] y se aplica calculando la siguiente función:

$$\lambda(k) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln \langle e^{nkA_n} \rangle, \quad (2.12)$$

conocida como la función generadora de cumulantes escalados (*scaled cumulant generating function*, SCGF). En su forma más sencilla, que es la que presentamos aquí, el Teorema de Gärtner-Ellis establece que si $\lambda(k)$ es diferenciable para todo $k \in \mathbb{R}$, entonces A_n satisface un LDP con una función de tasa dada por la *transformada de Legendre-Fenchel* de $\lambda(k)$:

$$I(a) = \max_{k \in \mathbb{R}} \{ka - \lambda(k)\}. \quad (2.13)$$

En muchas aplicaciones físicas, la función generadora de cumulantes $\lambda(k)$ es diferenciable y estrictamente convexa³. En ese caso, la transformada de Legendre-Fenchel se reduce a la más conocida transformada de Legendre, esto es,

$$I(a) = ka - \lambda(k(a)), \quad (2.14)$$

con $k(a)$ la única solución de $\lambda'(k) = a$. El teorema de Gärtner-Ellis es útil en la práctica puesto que evita el cálculo directo de $P(A_n)$. Al calcular la SCGF $\lambda(k)$ de A_n y comprobar que esta función es diferenciable, (i) probamos que $P(A_n)$ satisface un LDP y (ii) obtenemos su función de tasa, que controla la concentración de la distribución de probabilidades $P(A_n)$ en el límite $n \rightarrow \infty$.

³Una función $f(x)$ de variable real $x \in \mathbb{R}$ es convexa si el segmento de línea entre cualesquiera dos puntos de su gráfica está siempre por encima de su gráfica. Si $f(x)$ es dos veces derivable, es convexa si y sólo si $f''(x) \geq 0$. En el caso $f''(x) > 0$, excluyendo la igualdad, la función se llama estrictamente convexa.

Para determinadas variables, $\lambda(k)$ puede calcularse pero no es diferenciable, consúltese la Ref. [9] para ver ejemplos concretos. En este caso, puede probarse que la transformada de Legendre-Fenchel de $\lambda(k)$ proporciona lo que se conoce como la envolvente convexa de $I(a)$. Así, para caracterizar completamente la función de tasa, hay que usar otros métodos, como el *principio de contracción* [8, 9, 14, 20]. La base de este principio es expresar A_n como una función de $f(B_n)$ de alguna variable aleatoria B_n que sepamos que satisface un LDP con una función de tasa $J(b)$, es decir,

$$P(B_n = b) \approx e^{-nJ(b)}. \quad (2.15)$$

El principio de contracción establece que A_n también satisface un LDP con una función de tasa dada por

$$I(a) = \min_{b:f(b)=a} J(b). \quad (2.16)$$

La minimización en esta expresión aparece como una consecuencia natural de la utilización del método conocido como principio de Laplace [8, 9, 14] aplicado a la integral

$$P(A_n = a) = \int_{b:f(b)=a} db P(B_n = b) = \int db P(B_n = b)\delta(a - f(b)). \quad (2.17)$$

Asumiendo que la distribución de probabilidad $P(B_n)$ decae exponencialmente con n , como da (2.15), esta integral esta dominada por el término exponencial más grande tal que $f(b) = a$. En consecuencia, puede escribirse que

$$P(A_n = a) \approx \exp(-n \min_{b:f(b)=a} J(b)), \quad (2.18)$$

donde, en el espíritu propio de la LDT, no escribimos términos que sean subdominantes con respecto a la exponencial en n , ya que en rigor la función de tasa está definida a partir del logaritmo de la distribución de probabilidades, véase su definición rigurosa (2.11). La ecuación (2.18) implica que $P(A_n)$ satisface un LDP con una función de tasa dada por la ec. (2.16), esto es, el principio de contracción.

El nombre de “contracción” surge en el contexto de este resultado por el hecho de que la función f puede ser en general una función multivaluada, en cuyo caso estamos contrayendo las fluctuaciones de B_n a las fluctuaciones de A_n de tal forma que la probabilidad de la fluctuación $A_n = a$, es la probabilidad de la fluctuación más probable, aunque exponencialmente improbable, $B_n = b$ que da lugar a $A_n = a$. Esta relación entre la aparición de un término exponencialmente pequeño en las integrales y la posibilidad de aproximar esas integrales por sus términos dominantes usando el principio de Laplace explica también la aparición del máximo en

el teorema de Gärtner-Ellis y, de ahí, la transformada de Legendre-Fenchel que conecta las funciones de tasa y las SCGFs [9]. En este sentido, la LDT se puede ver como el “cálculo” apropiado para las distribuciones de probabilidad que decaen exponencialmente, un cálculo que conecta las propiedades de integrales del tipo $\langle e^{nkA_n} \rangle$, que son exponenciales en n , con las propiedades exponenciales de la propia distribución de probabilidades $P(A_n)$.

2.2.2. Grandes desviaciones en equilibrio

La aplicación de los resultados presentados en la sección anterior a los SE es directa. Consideremos un macroestado general, definido a partir de una magnitud física $M_N(w)$, en un sistema de N partículas. En concreto, investiguemos su distribución de probabilidades $P_\beta(M_N)$ en la colectividad canónica, que se define por la probabilidad a priori

$$P_\beta(w) = \frac{e^{-\beta H_N(w)}}{Z_N(\beta)}, \quad Z_N(\beta) = \int_{\Lambda_N} dw e^{-\beta H_N(w)}. \quad (2.19)$$

donde $\beta = (k_B T)^{-1}$, siendo T la temperatura del foco térmico con la que el sistema está en equilibrio. Si $P_\beta(M_N)$ satisface un LDP, es porque exista el límite

$$\lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{N} \ln P_\beta(M_N = m) = I_\beta(m), \quad (2.20)$$

que define la función de tasa $I_\beta(m)$ de la magnitud M_N en la colectividad canónica para una temperatura fijada β . LA SCGF asociada con esa función de tasa es

$$\lambda_\beta(k) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \langle e^{NkM_N} \rangle_\beta, \quad (2.21)$$

donde

$$\langle e^{NkM_N} \rangle_\beta = \int_{\Lambda_N} dw e^{NkM_N} P_\beta(w). \quad (2.22)$$

Si $\lambda_\beta(k)$ fuera diferenciable en k , entonces por el teorema de Gärtner-Ellis tendríamos que $I_\beta(m)$ sería la transformada de Legendre-Fenchel de $\lambda_\beta(k)$. La conexión entre el LDP de M_N y sus valores de equilibrio viene directamente de escribir el LDP informalmente en la forma

$$P_\beta(M_N = m) \approx e^{-NI_\beta(m)}. \quad (2.23)$$

Siendo las funciones de tasa siempre positivas, este resultado muestra que $P_\beta(M_N)$ decae exponencialmente rápido con N excepto en los puntos donde se anula $I_\beta(m)$. Por conservación de la probabilidad, esos puntos deben corresponder a los puntos donde $P_\beta(M_N)$ se concentra en el límite $N \rightarrow \infty$, por tanto a los valores de equilibrio de M_N . Matemáticamente, definimos el conjunto de valores de equilibrio m_β^{eq} de M_N en la colectividad canónica como el conjunto de mínimos globales y ceros de la función de tasa $I_\beta(m)$:

$$m_\beta^{\text{eq}} = \{m : I_\beta(m) = 0\}. \quad (2.24)$$

Una definición similar se puede dar para los valores de equilibrio de M_N en la colectividad microcanónica o cualquier otra colectividad, reemplazando $P_\beta(w)$ con la distribución de probabilidad a priori que define esas colectividades; véase la Sec. 5.3 de la Ref. [9].

La función de tasa describe por supuesto no sólo los estados de equilibrio sino también las fluctuaciones alrededor de esos estados. En particular, si la función de tasa $I_\beta(m)$ admite una expansión serie de Taylor de la forma

$$I_\beta(m) = a(m - m_\beta^{\text{eq}})^2 + O(|m - m_\beta^{\text{eq}}|^3) \quad (2.25)$$

alrededor de un valor de equilibrio dado m_β^{eq} , entonces las fluctuaciones *pequeñas* de M_N alrededor de m_β^{eq} están distribuidas de forma gaussiana. Sin embargo, como muestra la fig. 2.1, la función de tasa es raramente una parábola exacta, lo que significa que las fluctuaciones *grandes* de M_N en torno a m_β^{eq} no están distribuidas de manera gaussiana en general. Su distribución está determinada por la forma concreta de la función de tasa $I_\beta(m)$ en todo el rango de valores de m , que dependerá del sistema estudiado.

Esto explica el término *grande* en grandes desviaciones: al contrario que ocurre en el teorema del Límite Central, que da únicamente información sobre la distribución de las variables aleatorias cerca de su media, la LDT da información sobre las fluctuaciones o desviaciones tanto *grandes* como *pequeñas* alrededor de los valores más probables de variables aleatorias. Desde este punto de vista, la LDT puede verse como una generalización del teorema del Límite Central y/o de la Ley de los Grandes Números.

Las observaciones anteriores son válidas para cualquier variable aleatoria. Se puede establecer una conexión más concreta con los SE estudiando la función de grandes

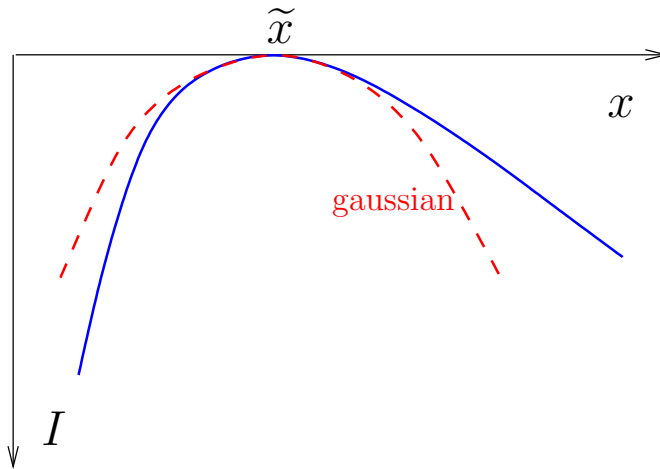


FIGURA 2.1: Representación de una curva típica de una función de tasa $I(x)$ (línea azul), junto con su aproximación gausiana (línea roja), válida para fluctuaciones pequeñas. Vemos que la probabilidad de un valor $x \gg \tilde{x}$ es típicamente mayor para la función $I(x)$ que para la aproximación gaussiana.

desviaciones de la energía por partícula $h_N = H_N/N$. Admitamos que la distribución a priori en el espacio de las fases viene dada por la distribución canónica (2.19), la probabilidad de que $h_N = e$ vendrá dada por

$$\begin{aligned} P_\beta(h_N = e) &= \int dw P_\beta(w) \delta(e - h_N(w)) = \frac{e^{-N\beta e}}{Z(\beta)} \int dw \delta(e - h_N(w)) \\ &= \frac{\Omega_N(e) e^{-N\beta e}}{Z(\beta)}. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Hemos definido la densidad de estados

$$\Omega_N(e) = \int dw \delta(e - h_N(w)), \quad (2.27)$$

como es habitual en mecánica estadística de equilibrio, Para prácticamente la totalidad de SE, se sabe que esta densidad de estados crece exponencialmente con N o, en general, con el volumen. Más concretamente, esto quiere decir que

$$\frac{1}{N} \ln \Omega_N(e) \rightarrow s(e), \quad N \gg 1, \quad (2.28)$$

donde $s(e)$ es independiente de N en el límite termodinámico que estamos considerando. La magnitud intensiva $s(e)$ es la entropía específica (por partícula) correspondiente al valor de la energía considerado e , una manera más laxa de escribir la ecuación anterior sería $\Omega_N(e) \approx \exp[Ns(e)]$, $N \gg 1$. Esta última igualdad asintótica habría que entenderla como que puede sustituirse $\Omega_N(e)$ por $\exp[Ns(e)]$

dentro de las integrales tipo Laplace o punto de silla que aparecen al calcular los valores medios de funciones de la energía. Teniendo en cuenta la definición de entropía por partícula, ecs. (2.27)-(2.28), y la definición de energía libre por partícula,

$$\varphi_0(\beta) = -\frac{1}{N\beta} \ln Z_N(\beta), \quad (2.29)$$

se pueden relacionar ambas, ya que

$$Z_N(\beta) = \int de \Omega_N(e) e^{-\beta Ne} \sim \int de e^{N[s(e)-\beta e]} \sim e^{N \max_e \{s(e)-\beta e\}}. \quad (2.30)$$

Combinando las ecuaciones (2.29) y (2.30), llegamos finalmente a que la energía libre φ_0 es proporcional a la transformada de Legendre-Fenchel de la entropía s ,

$$\varphi_0(\beta) = -\frac{1}{\beta} \max_e \{s(e) - \beta e\} = \frac{1}{\beta} \inf_e \{\beta e - s(e)\}. \quad (2.31)$$

Vamos a usar el teorema de Gärtner-Ellis para intentar calcular la función de tasa de la energía $I_\beta(e)$. En primer lugar, calculamos la función generatriz de cumulantes $\lambda_\beta(k)$, definida en la ecuación (2.12). En el presente contexto,

$$\lambda_\beta(k) \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \langle e^{Nke} \rangle_\beta. \quad (2.32)$$

En la igualdad, el valor medio se toma con la distribución de probabilidades $P(h_N = e)$ que hemos calculado en el párrafo anterior. Por tanto,

$$\langle e^{Nke} \rangle_\beta = \int de e^{Nke} P_\beta(h_N = e). \quad (2.33)$$

Ahora tenemos en cuenta las ecuaciones (2.26), (2.28) y (2.29) para escribir

$$\langle e^{Nke} \rangle_\beta \sim \int de e^{N[k e - \beta e + s(e) + \beta \varphi_0(\beta)]} \sim e^{N \max_e \{k e - \beta e + s(e) + \beta \varphi_0(\beta)\}}, \quad (2.34)$$

lo que es válido en el límite termodinámico $N \gg 1$. Combinando las ecuaciones (2.32) y (2.33) obtenemos que

$$\lambda_\beta(k) = \max_e \{k e - \beta e + s(e) + \beta \varphi_0(\beta)\}, \quad (2.35)$$

se tiene que $\lambda_\beta(k)$ tiene la forma de una transformada de Legendre-Fenchel, en concreto de la función

$$I_\beta(e) = \beta e - s(e) - \beta \varphi_0(\beta). \quad (2.36)$$

Hemos denominado esta función $I_\beta(e)$, que es el nombre intuitivo para la función de tasa de la energía, ya que coincide con ella. Con bastante generalidad, la transformada de Legendre-Fenchel es con bastante generalidad autoinversa o involutiva [20]: la transformada de Legendre-Fenchel de la transformada de Legendre-Fenchel de una función es igual a esa misma función. Si se cumplen las condiciones matemáticas para este resultado, tendremos que se verifica un principio de grandes desviaciones para $P_\beta(h_N = e)$,

$$P_\beta(h_N = e) \sim e^{-NI_\beta(e)}, \quad I_\beta(e) = \beta \left[e - \frac{s(e)}{\beta} - \varphi_0(\beta) \right]. \quad (2.37)$$

Su función de tasa $I_\beta(e)$ puede interpretarse como proporcional a la diferencia entre la energía libre correspondiente a cualquier estado de energía e , $e - \frac{s(e)}{\beta}$, y la energía libre $\varphi_0(\beta)$ en los estados de equilibrio⁴. Los posibles valores o estados de equilibrio se corresponden a las energías por partícula que maximicen (y anulen) $I_\beta(e)$: derivando con respecto a e se obtiene la relación termodinámica $\beta = \partial s(e)/\partial e$. Esto es consistente con el crecimiento exponencial de $\Omega_N(e)$ propuesto en la ecuación (2.28), ya que tanto β como las entropía $s(e)$ y energía e por partícula son magnitudes intensivas. Si, además, usamos la ecuación (2.31), obtenemos que $I_\beta(e)$ se anula en los valores de equilibrio de la energía por partícula, consistentemente con la concentración de la probabilidad en esos valores que predice la LDT en el límite termodinámico.

2.2.3. Grandes desviaciones fuera del equilibrio

Vamos a considerar ahora un macroestado fuera del equilibrio u observable $M_n(\mathbf{w})$ que involucra n pasos de tiempo, para un proceso de Markov $\mathbf{w} = \{w_1, w_2, \dots, w_n\}$ descrito por los elementos de la matriz de transición $P(w'|w)$. Las propiedades de las grandes desviaciones se pueden estudiar de manera similar a como lo hemos hecho en el caso de los macroestados de equilibrio calculando la SCGF $\lambda(k)$ asociada con la magnitud de interés M_n . Después, si $\lambda(k)$ es diferenciable, podemos obtener la función de tasa de M_n como su transformada de Legendre-Fenchel. Como estamos asumiendo que el proceso estocástico que describe la dinámica microscópica es markoviano, podemos usar esta propiedad para obtener una expresión más explícita de $\lambda(k)$. Por ejemplo, en el caso de un observable aditivo como el introducido

⁴Todas las energías en esta afirmación se entienden por partícula. La constante de proporcionalidad es β .

en la ec. (2.7), tenemos

$$\lambda(k) = \ln \zeta(\tilde{P}_k), \quad (2.38)$$

donde $\zeta(\tilde{P}_k)$ el autovalor mayor de la llamada matriz de transición *modificada* \tilde{P}_k , cuyos elementos vienen dados por

$$\tilde{P}_k(w'|w) = P(w'|w)e^{kf(w')}. \quad (2.39)$$

Para los observables de tipo corriente M_n mostrados en la ec. (2.8), tenemos el mismo resultado, pero con la matriz de transición modificada \tilde{P}_k dada por

$$\tilde{P}_k(w'|w) = P(w'|w)e^{kf(w',w)}. \quad (2.40)$$

Para los procesos de Markov en tiempo continuo, los resultados de arriba se traducen como sigue. Para un funcional aditivo

$$M_n(w) = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt f(w_t), \quad (2.41)$$

la SCGF $\lambda(k)$, calculada en el límite $\tau \rightarrow \infty$, está dada por el autovalor más grande del generador de la dinámica *modificado*,

$$\tilde{G}_k(w', w) = G(w', w) + kf(w)\delta_{w',w}, \quad (2.42)$$

siendo $G(w', w)$ los elementos del generador original del proceso. Nótese la ausencia aquí del logaritmo, dado que estamos trabajando con el generador, no con la matriz de transición. Para observables tipo corriente tenemos análogamente la forma

$$M_\tau(w) = \frac{1}{\tau} \sum_{i=0}^{N(\tau)-1} f(w_{t_i}, w_{t_{i+1}}) \quad (2.43)$$

donde la suma se hace sobre las $N(\tau)$ transiciones aleatorias $w_{t_i} \rightarrow w_{t_{i+1}}$, entre diferentes estados. De nuevo, $\lambda(k)$ esta dado por el autovalor más grande del generador de una dinámica modificada, cuyos elementos son

$$G_k(w, w') = G(w, w')e^{kf(w,w')}. \quad (2.44)$$

Otros observables que involucren otros parámetros de escalamiento, además del número de partículas o el tiempo, se pueden tratar de una manera similar. En todos los casos, los LDPs que obtenemos nos dan información sobre las fluctuaciones

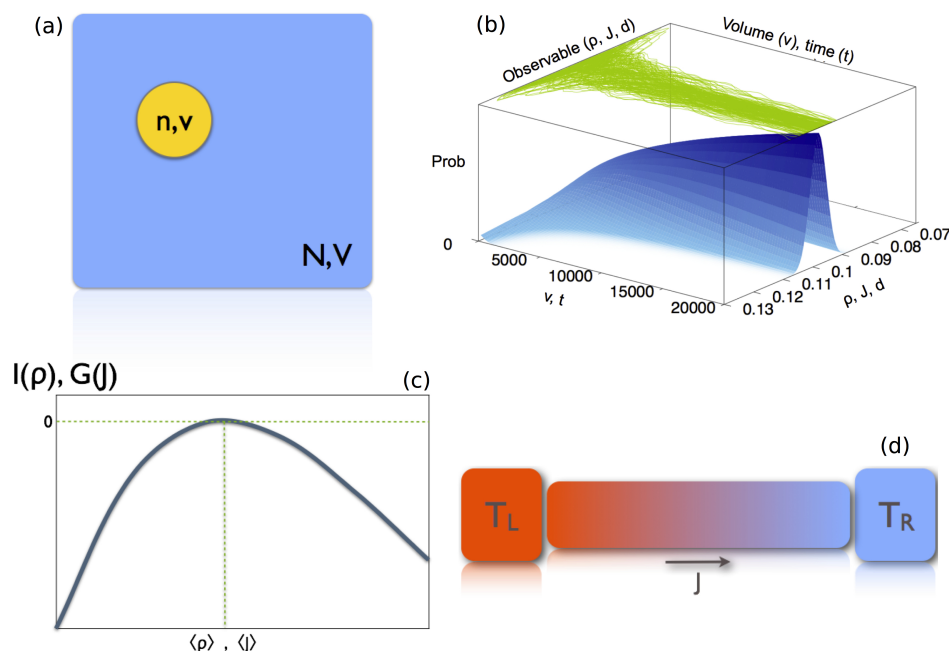


FIGURA 2.2: (a) Fluctuaciones de la densidad en un subsistema con volumen v para un sistema en equilibrio. (b) Convergencia de la corriente integrada en el espacio y el tiempo a su valor típico $\langle q \rangle$ para diferentes realizaciones del sistema (nube de líneas superior), y una representación de la concentración de la probabilidad asociada con el LDP cuando el tiempo crece. (c) Curva típica de una función de grandes desviaciones. (d) Esquema de una situación típica en un sistema fuera del equilibrio con un gradiente de temperatura.

del observable de interés, de manera similar a como ocurre en los LDPs para el equilibrio. En particular, el mínimo global y los ceros de la función de tasa determinan los valores típicos del observable, que se interpretan físicamente como los estados estacionarios típicos o ecuaciones o estados hidrodinámicos, dependiendo del observable considerado. Análogamente, la forma de la curva de la función de tasa alrededor del mínimo determina el comportamiento de las fluctuaciones grandes y pequeñas del observable alrededor de sus valores típicos, como se ve en la figura 2.2.

Con el conocimiento de la función de tasa de un observable, es posible por ejemplo determinar si ese observable satisface una relación de simetría de fluctuación. Para ser más concretos, consideremos un observable M_τ integrado sobre el tiempo τ y asumamos que satisface un LDP con una función de tasa $I(m)$. Decimos que M_τ satisface una *relación de fluctuación de tipo Gallavotti-Cohen* si se verifica para todo valor m que

$$\frac{P(M_\tau = m)}{P(M_\tau = -m)} \sim e^{2\tau\epsilon m}, \quad (2.45)$$

siendo ϵ una constante positiva. Físicamente, esto significa que las fluctuaciones positivas de M_τ son exponencialmente más probables que las negativas de igual magnitud. En términos de grandes desviaciones, es fácil ver que una condición suficiente, pero no necesaria, para tener este resultado es que la correspondiente función de tasa $I(m)$ satisfaga la siguiente relación de simetría,

$$I(-m) - I(m) = 2\epsilon m. \quad (2.46)$$

En términos de la SCGF, la condición suficiente equivalente a la anterior es que

$$\lambda(k) = \lambda(-k - 2\epsilon). \quad (2.47)$$

2.3. Estadística de la corriente en sistemas conservativos difusivos fuera del equilibrio

2.3.1. Teoría de las fluctuaciones macroscópicas

En una serie de trabajos recientes [11, 21–23], Bertini, De Sole, Gabrielli, Jonas-Lasinio, y Landim han introducido una teoría de fluctuaciones macroscópicas (MFT) que describe las fluctuaciones dinámicas en sistemas difusivos con inyección de energía, así como sus LDFs asociadas. Para ello, parten de una descripción macroscópica reescalada del sistema de interés, típicamente una ecuación hidrodinámica, donde los únicos parámetros a determinar son los coeficientes de transporte. Este enfoque es muy general, pero se traduce en un problema variacional muy complejo para obtener las LDF de las magnitudes relevantes. Por lo tanto, para poder avanzar en esta teoría, se han explorado diferentes esquemas para las soluciones y propuesto hipótesis que simplifiquen el problema variacional resultante. Un ejemplo es el llamado *principio de aditividad*, que es aplicable bajo determinadas condiciones y que ha permitido el cálculo explícito de las LDF relevantes, abriendo la puerta a un procedimiento sistemático para el cálculo de las mismas en sistemas fuera del equilibrio. Esta conjetura de aditividad se puede violar, esto es, dejar de ser válida, para fluctuaciones extremas mediante una transición de fase a nivel fluctuante que produce una ruptura de simetría [24].

Procedemos ahora a describir la MFT en detalle. Consideramos una clase amplia de sistemas caracterizados por una magnitud que se conserva localmente. Por tanto, nuestro punto de partida es una ecuación de continuidad para dicha magnitud:

energía, partículas, momento, carga, etc. [10, 11, 21–23, 25]

$$\partial_t \rho(\mathbf{r}, t) = -\nabla \cdot [\mathbf{Q}_E(\rho(\mathbf{r}, t)) + \xi(\mathbf{r}, t)]. \quad (2.48)$$

Esta ecuación se obtiene tras hacer el límite apropiado, en el que las coordenadas de tiempo y de espacio microscópico, t y r , se reescalan difusivamente: $t = t/N^2$, $r = r/N$, donde N es el tamaño del sistema [26]. Por consiguiente, las coordenadas macroscópicas son $(\mathbf{r}, t) \in \Lambda \times [0, \tau]$, donde $\Lambda \equiv [0, 1]^d$ es el dominio espacial y d es la dimensionalidad del sistema. En la ec. (2.48), $\rho(\mathbf{r}, t)$ representa el campo de densidad, y $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{Q}_E(\rho(\mathbf{r}, t)) + \xi(\mathbf{r}, t)$ es el campo de corriente fluctuante, con una promedio local dado por $\mathbf{Q}_E(\rho(\mathbf{r}, t))$ que puede incluir en general el efecto de un campo conservativo externo \mathbf{E} ,

$$\mathbf{Q}_E(\rho(\mathbf{r}, t)) = \mathbf{Q}(\rho(\mathbf{r}, t)) + \sigma(\rho(\mathbf{r}, t))\mathbf{E} \quad (2.49)$$

El campo $\xi(\mathbf{r}, t)$ es un ruido gaussiano y blanco caracterizado por una varianza $\sigma(\rho(\mathbf{r}, t))$, que se suele denominar movilidad en este contexto

$$\langle \xi_i(\mathbf{r}, t) \rangle = 0; \langle \xi_i(\mathbf{r}, t) \xi_j(\mathbf{r}', t') \rangle = \frac{1}{N^d} \sigma(\rho) \delta_{i,j} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'), \quad (2.50)$$

siendo (i, j) las componentes de las coordenadas espaciales, $1 \leq i, j \leq d$. Este término de ruido da cuenta de las fluctuaciones aleatorias que existen en el sistema a nivel microscópico: representa los grados de libertad microscópicos rápidos que se promedian para obtener la ec. (2.48), y cuyo efecto neto en la evolución macroscópica es esta perturbación aleatoria gaussiana, consistentemente con el teorema del límite central. La ecuación (2.50) indica que $\xi(\mathbf{r}, t)$ escala como $N^{-d/2}$. Para sistemas de tamaño grande pero finito, $N \gg 1$, nos encontramos en el límite de ruido débil, solamente en el límite $N \rightarrow \infty$ se recupera exactamente la ecuación hidrodinámica determinista, sin ruido.

Los ejemplos que incluyen los sistemas descritos por la ec. (2.48) son fundamentalmente sistemas difusivos [10, 11, 21–24, 27–30], donde $\mathbf{Q}(\rho(\mathbf{r}, t))$ está dado por la ley de Fourier si ρ es una densidad de energía o por la ley de Fick si ρ es una densidad de masa

$$\mathbf{Q}(\rho(\mathbf{r}, t)) = -D(\rho) \nabla \rho(\mathbf{r}, t). \quad (2.51)$$

El coeficiente de transporte $D(\rho)$ se denomina difusividad. Para definir completamente el problema, hay que añadir a las ecuaciones (2.48)-(2.49) las condiciones de contorno apropiadas. Dependiendo de la situación física considerada, pueden

ser periódicas, en cuyo caso Λ es un toro de d dimensiones, o no homogéneas con

$$\varphi(\rho(\mathbf{r}, t)) = \varphi_0(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in \partial\Lambda \quad (2.52)$$

cuando existe inyección de energía a través de los contornos y posiblemente un gradiente externo: $\partial\Lambda$ es el contorno de Λ y φ_0 es el potencial químico de los reservorios en $\delta\Lambda$. Los coeficientes de transporte que aparecen en la ecuación (2.48) pueden medirse en experimentos o en simulaciones, y nos ofrecen una descripción cerrada del comportamiento de las fluctuaciones macroscópicas del sistema. Para los sistemas difusivos gobernados por la Ley de Fourier (2.51), el coeficiente de difusión $D(\rho)$ y la movilidad $\sigma(\rho)$ satisfacen una relación de Einstein local

$$D(\rho) = \frac{\sigma(\rho)}{\kappa(\rho)} \quad (2.53)$$

donde $\kappa(\rho)$ es la compresibilidad, $\kappa(\rho)^{-1} = f_0''(\rho)$, y $f_0(\rho)$ es la energía libre del sistema en equilibrio. Las ecuaciones de arriba describen un sistema en equilibrio cuando el estado estacionario esté caracterizado por una corriente nula. Esto es lo que sucede cuando tenemos condiciones periódicas de contorno y no hay campo externo, o cuando, con condiciones de contorno no periódicas, los potenciales químicos en los contornos son los mismos. Cuando la corriente en el estado estacionario sea no nula, el sistema estará fuera del equilibrio.

Consideremos ahora la probabilidad de observar una historia $\{\rho(\mathbf{r}, t), \mathbf{j}(\mathbf{r}, t)\}_0^\tau$ de duración τ para los campos de densidad y corriente, que puede ser diferente de la trayectoria hidrodinámica promedio. Esta probabilidad puede escribirse como una integral de camino sobre todas las posibles realizaciones del ruido $\{\xi(\mathbf{r}, t)\}_0^\tau$, pesadas por su medida gaussiana. Más concretamente,

$$P(\{\rho, \mathbf{j}\}_0^\tau) = \int \mathbb{D}\xi \exp\left(-N^d \int_0^\tau dt \int_\Lambda d\mathbf{r} \frac{\xi^2}{2\sigma(\rho)} \Pi_t \Pi_r \delta(\xi - (\mathbf{j} - \mathbf{Q}_E(\rho)))\right), \quad (2.54)$$

esta integral está restringida a las realizaciones compatibles con la ecuación de continuidad (2.48), que debe verificarse en cada punto del espacio y el tiempo, esto es

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0. \quad (2.55)$$

Además, hay que tener en cuenta las condiciones de contorno, como hemos discutido anteriormente. Nótese que el acoplamiento entre ρ y \mathbf{j} expresado por la ecuación de continuidad no determina uno de estos campos unívocamente a partir del otro⁵.

⁵Por ejemplo, $\rho_0(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) + \chi(\mathbf{r})$ y $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{g}(\mathbf{r}, t)$, con $\chi(\mathbf{r})$ y $\mathbf{g}(\mathbf{r}, t)$ con divergencia nula, satisfacen la misma ecuación de continuidad. En otras palabras, esto significa que a partir de

Esta no unicidad en la descripción macroscópica aparece como consecuencia de los promedios sobre las variables rápidas o grano grueso que conducen desde la dinámica microscópica determinista a la dinámica mesoscópica estocástica. La ec. (2.54) naturalmente lleva a [25]

$$P(\{\rho, \mathbf{j}\}_0^\tau) \sim \exp(+N^d I_\tau(\rho, \mathbf{j})) \quad (2.56)$$

que tiene la forma de un LDF. El funcional de tasa $I_\tau(\rho, \mathbf{j})$ está dado por

$$I_\tau(\rho, \mathbf{j}) = - \int_0^\tau dt \int_\Lambda d\mathbf{x} \frac{(\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{Q}_E(\rho))^2}{2\sigma(\rho)}. \quad (2.57)$$

Este funcional juega un papel importante en la MFT y sus extensiones, ya que contiene toda la información necesaria para calcular las LDFs de los observables macroscópicos relevantes, haciendo uso del principio de contracción, que vimos en la sección 2.2.1. Por ejemplo, Bertini y sus colaboradores han investigado las fluctuaciones del campo de la densidad fuera del equilibrio, obteniendo una ecuación de Hamilton-Jacobi para el problema variacional que permite calcular la LDF correspondiente [11, 21–23]. Además, la MFT nos muestra que el *camino óptimo* que lleva a una fluctuación macroscópica de la densidad dada es el inverso en el tiempo del camino de relajación desde esta fluctuación de acuerdo con cierta ley hidrodinámica adjunta, no necesariamente igual a la original [11, 21–23]. Este resultado general, válido para una situación arbitrariamente lejos del equilibrio, se reduce a la teoría de Onsager-Machlup [31] cuando las desviaciones respecto al equilibrio son pequeñas, y es lícito linealizar las ecuaciones alrededor del equilibrio.

2.3.1.1. Termodinámica de las corrientes

Ahora vamos a centrarnos en la estadística de las corrientes. Comprender como la dinámica microscópica determina los promedios a tiempos largos de las corrientes y sus fluctuaciones es uno de los principales objetivos de la física estadística de sistemas fuera del equilibrio. Con mucha generalidad, se puede decir que un estado estacionario de no equilibrio se diferencia de un estado de equilibrio por la presencia de corrientes en el sistema. En consecuencia, la corriente es un observable que caracteriza el comportamiento macroscópico de muchos sistemas fuera del equilibrio. Nos centraremos en la probabilidad $P_\tau(\mathbf{J})$ de observar una corriente

un campo de densidad podemos determinar el campo de corriente más un vector con divergencia nula.

promediada en el espacio y el tiempo

$$J = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \int_\Lambda dr j(r, t). \quad (2.58)$$

Esta probabilidad se puede escribir como

$$P_\tau(J) = \int^* \mathbb{D}\rho \mathbb{D}j P(\{\rho, j\}_0^\tau) \delta \left(J - \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \int_\Lambda dr j(r, t) \right),$$

donde el asterico quiere decir que la integral de camino está restringida a las historias $\{\rho, j\}_0^\tau$ que verifican la ecuación de continuidad (2.55). Dado que el exponente de $P(\{\rho, j\}_0^\tau)$ es proporcional tanto a τ como a N^d , véase la ec. (2.56), para tiempos y tamaños de sistema grandes la integral de arriba está dominada por el máximo del exponente. Esto lleva a un cálculo tipo “punto de silla”, a partir del cual la probabilidad $P_\tau(J)$ verifica el siguiente LDP

$$P_\tau(J) \sim \exp(+\tau N^d G(J)), \quad (2.59)$$

donde el funcional de tasa de la corriente $G(J)$ es

$$G(J) = -\frac{1}{\tau} \min_{\{\rho, j\}_0^\tau} \left\{ \int_0^\tau dt \int_\Lambda dr \frac{(j(r, t) - Q_E(\rho))^2}{2\sigma(\rho)} \right\}, \quad (2.60)$$

sujeto a las condiciones (2.55) y (2.58). La LDF $G(J)$ mide el decaimiento exponencial con el que la corriente tiende a su valor estacionario, $J \rightarrow J_{est}$, en el límite $N^d \tau \gg 1$. Aunque por simplicidad no se ha indicado explícitamente en la notación empleada, la LDF depende paramétricamente del intervalo de tiempo considerado τ . Alternativamente, podemos considerar que la LDF $G(J)$ de la ecuación (2.60) se calcula para un intervalo de tiempo τ muy grande, esto es, en el límite $\tau \rightarrow \infty$. Los campos de densidad y corrientes óptimos soluciones del problema variacional de la ec. (2.60), que denotaremos por $\rho_J(r, t)$ y $j_J(r, t)$, pueden interpretarse como los caminos óptimos que el sistema sigue en el espacio de las fases mesoscópico con objeto de mantener un cierto valor de la corriente integrada J en el espacio y en el tiempo.

A pesar de su complejidad, la LDF de la corriente $G(J)$ obedece una propiedad de simetría que aparece como consecuencia de la reversibilidad de la dinámica microscópica subyacente. Esta relación de simetría se conoce como el teorema de fluctuación Gallavotti-Cohen [32], que como hemos visto en la sección anterior, relaciona la probabilidad de observar una fluctuación de la corriente integrada J durante un tiempo τ con la probabilidad del evento inverso, en que la corriente es

igual a $-J$,

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau N^d} \ln \left(\frac{P_\tau(J)}{P_\tau(-J)} \right) = 2\epsilon \cdot J, \quad (2.61)$$

donde ϵ es cierto vector constante, que depende en general de las condiciones de contorno impuestas –físicamente, de los baños con los que el sistema esté en contacto en su contorno– y del campo externo aplicado [33]. La ecuación anterior es la particularización para las fluctuaciones de la corriente del resultado general (2.45).

2.3.2. Aditividad de las fluctuaciones de la corriente

La ecuación (2.60) define un problema variacional complejo, para los campos de corriente y densidad [10, 11, 21–23]. Las siguientes hipótesis, cuya imagen física discutiremos más adelante, simplifican la complejidad del problema variacional asociado:

1. Los perfiles óptimos de corriente y densidad que soportan una fluctuación dada son independientes en el tiempo, $\rho_J(\mathbf{r})$ y $\mathbf{j}_J(\mathbf{r})$. Esto, junto con la ecuación de continuidad (2.55) que acopla ambos campos, implica que el campo vectorial de la corriente tiene también divergencia nula, $\nabla \cdot \mathbf{j}_J(\mathbf{r}) = 0$.
2. Una simplificación más, consiste en asumir que este campo de corriente óptimo no tiene estructura espacial, es decir, que $\mathbf{j}_J(\mathbf{r}) = J$. En el caso unidimensional, esta hipótesis 2 no es independiente de la primera, ya que la condición de divergencia nula implica que $dJ(x)/dx = 0$, esto es, J es constante.

La imagen física detrás de estas hipótesis se corresponde a un sistema que, después de un tiempo transitorio, muy pequeño sobre la escala difusiva τ , el sistema se sitúa en un estado independiente del tiempo con un campo de densidad determinado y un campo de corriente espacialmente uniforme igual a J . Se espera que este comportamiento minimice el coste de una fluctuación, al menos para desviaciones pequeñas y moderadas respecto del comportamiento promedio en el estado estacionario de no equilibrio, para el que las hipótesis 1 y 2 se cumplen trivialmente. Estas hipótesis son las generalizaciones a dimensión arbitraria del principio de aditividad introducido por Bodineau y Derrida para un medio unidimensional difusivo [27]. La validez de esta conjetura ha sido comprobada numéricamente por Hurtado y Garrido con un gran grado de precisión en un intervalo amplio de fluctuaciones de la corriente en algunos sistemas sencillos [24, 28, 29, 34, 35].

Por otro lado, también se sabe que para fluctuaciones suficientemente grandes el principio de aditividad deja de ser válido, y los caminos óptimos soluciones del problema variacional se vuelven dependientes del tiempo.

A partir de las hipótesis del principio de aditividad, podemos escribir la LDF para la corriente, dada por la ec. (2.60) como [10, 25, 27, 36]

$$G(J) = - \min_{\rho(\mathbf{r})} \int_{\Lambda} d\mathbf{r} \frac{[J - Q_E(\rho)]^2}{2\sigma(\rho(\mathbf{r}))}. \quad (2.62)$$

Aunque el ruido de la corriente, que está en la base del procedimiento matemático que lleva a la LDF en la ecuación anterior, es gaussiano, la distribución de la corriente integrada tiene colas no gaussianas [10, 11, 21–23, 28, 29]. La forma concreta de estas colas se deduce a partir de la solución de la ecuación de Euler-Lagrange complicada, no lineal, que se sigue a partir del procedimiento variacional implícito en la ecuación (2.62). El perfil de densidad óptimo $\rho_J(\mathbf{r})$ es entonces la solución de

$$\frac{\delta\pi_2(\rho(\mathbf{r}))}{\delta\rho(\mathbf{r}')} - 2J \cdot \frac{\delta\pi_1(\rho(\mathbf{r}))}{\delta\rho(\mathbf{r}')} + J^2 \frac{\delta\pi_0(\rho(\mathbf{r}))}{\delta\rho(\mathbf{r}')} = 0, \quad (2.63)$$

complementada con las condiciones de contorno apropiadas. Hemos usado la notación $\frac{\delta}{\delta\rho(\mathbf{r}'')}$ para la derivada funcional, y definido

$$\pi_n(\rho(\mathbf{r})) = \int_{\Lambda} d\mathbf{r} W_n(\rho(\mathbf{r})), \quad W_n(\rho(\mathbf{r})) \equiv \frac{Q_E^n(\rho(\mathbf{r}))}{\sigma(\rho(\mathbf{r}))}. \quad (2.64)$$

Para los modelos difusivos en los que estamos interesados, se tiene que $Q_E(\rho(\mathbf{r})) = -D(\rho)\nabla\rho$, por tanto la ecuación diferencial (2.63) para el perfil óptimo toma la forma

$$J^2 a'(\rho_J) - c'(\rho_J)(\nabla\rho_J)^2 - 2c(\rho_J)\nabla^2\rho_J = 0, \quad (2.65)$$

donde $a(\rho_J) = (2\sigma(\rho_J))^{-1}$, $c(\rho_J) = D^2(\rho_J)a(\rho_J)$ y la prima denota la derivada con respecto al argumento. Multiplicando la ecuación de arriba por $\nabla\rho_J$, obtenemos tras integrar

$$D(\rho_J)^2(\nabla\rho_J)^2 = J^2 [1 + 2\sigma(\rho_J)K(J^2)], \quad (2.66)$$

donde $K(J^2)$ es una constante de integración que garantiza la aplicación de las condiciones de contorno para ρ_J . Las ecs. (2.62) y (2.66) determinan completamente la distribución de corriente $P_\tau(J)$ en un medio difusivo que, recordemos, es en general no gaussiana, excepto en el límite de pequeñas fluctuaciones.

Originalmente, el principio de aditividad se presentó para sistemas difusivos unidimensionales [27]. A continuación, esquematizamos esta presentación, que posteriormente se ha demostrado que es equivalente a nuestras dos hipótesis 1 y 2 [11, 21–23]. Sea $P_N(J, \rho_L, \rho_R, \tau)$ la probabilidad de observar una corriente promediada en el tiempo J durante un tiempo grande τ en un sistema unidimensional de tamaño N en contacto con dos reservorios a densidades ρ_L y ρ_R . El principio de aditividad relaciona esta probabilidad con las probabilidades de mantener una fluctuación de la misma corriente en dos subsistemas de tamaño $N-l$ y l , es decir,

$$P_N(J, \rho_L, \rho_R, \tau) = \max_{\rho} [P_{N-l}(J, \rho_L, \rho, \tau) \times P_l(J, \rho, \rho_R, \tau)]. \quad (2.67)$$

La maximización sobre la densidad de contacto ρ puede racionalizarse escribiendo esta probabilidad como una integral sobre ρ del producto de las probabilidades para los subsistemas, y admitiendo que éstas deberían obedecer también un principio de grandes desviaciones. A partir de ahí, un cálculo de punto de silla en el límite de tiempos grandes τ nos lleva a la expresión anterior. El principio de aditividad puede reescribirse para la LDF de la corriente como

$$NG(J, \rho_L, \rho_R) = \max_{\rho} [(N-l)G(J, \rho_L, \rho) + lG(J, \rho, \rho_R)]. \quad (2.68)$$

Dividiendo reiterativamente el sistema de tamaño N en segmentos cada vez más pequeños, y asumiendo fluctuaciones locales gaussianas, es fácil demostrar que en el límite continuo se puede obtener una forma variacional para $G(J, \rho_L, \rho_R)$ que es una expresión análoga a la ec. (2.62).

2.3.3. El modelo KMP en el caso conservativo

En 1982, C. Kipnis, C. Marchioro y E. Presutti [37] propusieron un modelo de red (modelo KMP) simple con objeto de entender de una manera matemáticamente rigurosa el transporte de energía en sistemas con muchos grados de libertad. Una de las características que ha contribuido a la “popularidad” del modelo KMP es la posibilidad de demostrar rigurosamente la ley de Fourier en el caso unidimensional, para un gradiente de temperaturas arbitrario. Además, la aproximación de equilibrio local es exacta en este estado estacionario de no equilibrio. Éstas y otras propiedades interesantes del modelo KMP lo convierten en un campo ideal para probar la MFT y sus posibles extensiones.

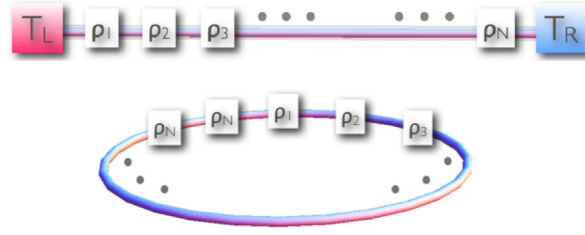


FIGURA 2.3: Representamos el modelo de Kipnis-Marchioro-Presutti de transporte en redes 1D bajo diferentes condiciones de contorno. Arriba: Sistema acoplado a baños térmicos a diferentes temperaturas $T_L \neq T_R$. Abajo: Condiciones de contorno periódicas. Cada sitio de la red está caracterizado por una energía $\rho_i \geq 0$, $i \in [0, N]$, y la dinámica se introduce mediante colisiones entre los vecinos más próximos, redistribuyéndose la energía dentro del par que colisiona.

Originalmente, el modelo de KMP está definido en una red unidimensional con N sitios, véase la figura 2.3, aunque se puede generalizar fácilmente a una red de dimensión arbitraria. Cada sitio de la red está caracterizado por su energía, de modo que la energía total del sistema es la suma de las energías de todos los sitios. De esta manera, no hay interacción entre los sitios de la red a nivel “estático”, pero sí en la dinámica. Ésta se modela mediante una cadena de Markov (el tiempo es discreto): en cada paso de tiempo se redistribuye la energía localmente, dentro de una pareja de vecinos más próximos escogida al azar. Siendo más concretos, la configuración microscópica se define en cada instante por el conjunto $\rho = \{\rho_i, i = 1, \dots, N\}$, donde $\rho_i \geq 0$ es la energía del sitio i . En un paso de tiempo, se escoge completamente al azar una pareja de vecinos más próximos $(i, i+1)$, y sus energías evolucionan desde (ρ_i, ρ_{i+1}) a (ρ'_i, ρ'_{i+1}) con la “regla de colisión”

$$\rho'_i = p(\rho_i + \rho_{i+1}), \quad \rho'_{i+1} = (1-p)(\rho_i + \rho_{i+1}), \quad (2.69)$$

donde p es un número aleatorio uniformemente distribuido en el intervalo $[0, 1]$. Esta dinámica conserva la energía, se verifica que $\rho_i + \rho_{i+1} = \rho'_i + \rho'_{i+1}$, $\forall p$. En este caso *conservativo*, las probabilidades de transición del proceso de Markov verifican balance detallado con la distribución microcanónica: en un sistema aislado, sin inyección de energía, el sistema alcanzaría el estado de equilibrio descrito por la distribución microcanónica en el límite de tiempos grandes. En este sentido, se

dice a veces que la dinámica es “reversible”, porque la probabilidad de una transición $(\rho_i, \rho_{i+1}) \rightarrow (\rho'_i, \rho'_{i+1})$ es igual a la del proceso inverso $(\rho'_i, \rho'_{i+1}) \rightarrow (\rho_i, \rho_{i+1})$. Sin embargo, el estado estacionario al que tiende el sistema no es siempre el correspondiente al colectivo microcanónico: en general depende de las condiciones de contorno. En el artículo original [37], y en otros estudios del transporte de energía, se consideran contornos abiertos en el modelo KMP con extremos en las posiciones $i = 1, N$ de la cadena unidimensional conectada a dos baños térmicos a diferentes temperaturas, véase la figura 2.3. En este caso, los sitios extremos pueden intercambiar energía con los baños térmicos, a temperaturas T_L en $i = 1$ y T_R en $i = N$, es decir, $\rho_{1,N} \rightarrow \rho'_{1,N}$ con la siguiente regla

$$\rho'_{1,N} = p(\tilde{\rho}_{R,L} + \rho_{1,N}) \quad (2.70)$$

donde $p \in [0, 1]$ es de nuevo un número aleatorio uniformemente distribuido y $\tilde{\rho}_{R,L}$ es otro número aleatorio independiente tomado de una distribución de Gibbs a la temperatura correspondiente, $P(\rho_k) = \beta_k \exp(-\rho_k \beta_k)$, $k = L, R$, con $\beta_k = T_k^{-1}$ si medimos la temperatura en unidades de energía, esto es, tomamos la constante de Boltzmann igual a la unidad. Alternativamente, podemos pensar que hemos introducido dos sitios extra en la red, $i = 0$ para la izquierda e $i = N + 1$ para la derecha. Cuando se escogen las parejas $(0, 1)$ o $(N, N + 1)$ tenemos una colisión “normal”, pero las energías de los sitios de los baños son aleatorias, y siempre están distribuidas de acuerdo con la distribución canónica correspondiente. Para $T_L \neq T_R$, se ha demostrado rigurosamente que el modelo KMP alcanza un estado estacionario de no equilibrio en el límite de escalamiento hidrodinámico $N \rightarrow \infty$, con una corriente de energía promedio no nula descrita por la ley de Fourier,

$$J_{est} = D(\rho) \frac{d\rho_{est}(x)}{dx}, \quad x \in [0, 1], \quad (2.71)$$

donde $D(\rho) = 1/2$ es la conductividad (o difusividad) para el modelo KMP, y $\rho_{est}(x)$ es un perfil estacionario lineal

$$\rho_{est}(x) = T_L + x(T_R - T_L). \quad (2.72)$$

Además, también se ha probado la *convergencia hacia la medida de Gibbs* en este límite [37], esto es, que ρ_i , $i \in [1, N]$, tiene una distribución exponencial con la temperatura local $\rho_{est}(x_i = \frac{i}{N+1})$ en el límite termodinámico. Esto es lo que se conoce como la aproximación de equilibrio local en la bibliografía de la física estadística de no equilibrio. Por tanto, en un lenguaje más físico, podemos decir que la aproximación de equilibrio local es exacta para el modelo KMP. Además, esta

afirmación es cierta en un estado estacionario del modelo KMP arbitrariamente lejos del equilibrio, ya que el valor del gradiente de temperaturas no tiene por qué ser pequeño.

La ecuación de evolución mesoscópica para este modelo es

$$\partial_t \rho + \partial_x \left(-\frac{1}{2} \partial_x \rho + \xi \right) = 0 \quad (2.73)$$

que es la expresión de la ley de Fourier fluctuante, compárese con la ec. (2.48). La amplitud del término de ruido viene dada por $\sigma(\rho)$, véase la ec. (2.50), que es el segundo coeficiente de transporte que necesitamos para completar la descripción macroscópica del sistema. La movilidad, que mide la varianza de las fluctuaciones de la corriente de energía en equilibrio, esto es, cuando no imponemos un gradiente de temperatura en el sistema, $\rho_L = \rho_R$, tiene la expresión $\sigma(\rho) = \rho^2$.

El modelo de KMP es un candidato óptimo para probar y estudiar la MFT y sus predicciones porque: a) Las ecuaciones de la MFT para este modelo son suficientemente simples para obtener soluciones analíticas, y b) su dinámica microscópica simple permite un estudio numérico detallado de las fluctuaciones de la corriente. Las fluctuaciones “típicas”, que corresponden a la aproximación gaussiana alrededor del valor medio de la corriente, pueden obtenerse con una simulación de Monte Carlo estándar. Sin embargo, para investigar numéricamente las grandes desviaciones de la corriente, hay que usar un método computacional novedoso que permite aumentar la estadística de los eventos raros que conducen a estas grandes fluctuaciones [38, 39]. Una descripción detallada de este procedimiento numérico, así como de su base teórica, puede encontrarse en el apéndice F. En la figura 2.4 podemos observar que existe un buen acuerdo entre los resultados analíticos y los resultados de las simulaciones en el rango de validez del método computacional. La función $\mu(\lambda)$ es la transformada de Legendre-Fenchel de la función de grandes desviaciones de la corriente⁶.

A lo largo de esta tesis, extenderemos este modelo KMP al caso disipativo y no lineal, introduciendo (i) un mecanismo de disipación de energía en las “colisiones”, que rompe la condición de balance detallado con la distribución microcanónica o, usando otro lenguaje, la reversibilidad de la dinámica, y (ii) una elección de la pareja de vecinos más próximos que colisiona que no es completamente al azar, sino con una probabilidad que depende de la energía del par. El punto (ii) lleva

⁶Para aclarar la notación, en relación con el caso general expuesto en la sección 2.2, por ejemplo en la relación de Gallavotti-Cohen (2.47), aquí λ juega el papel de k en la teoría general mientras que μ juega el papel de λ .

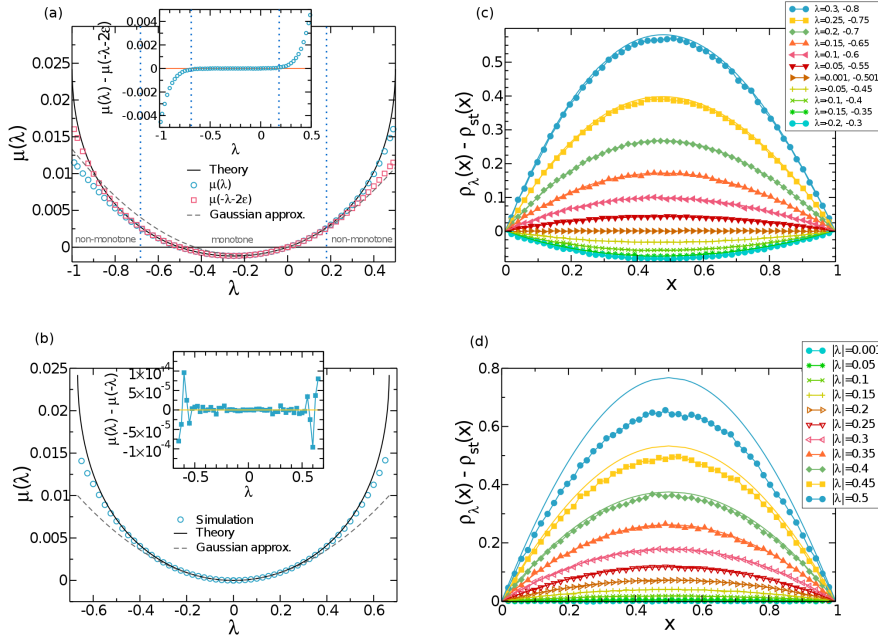


FIGURA 2.4: (a) Transformada de Legendre de la LDF de la corriente para el modelo KMP en una dimensión con un gradiente de temperatura ($\rho_L = 2, \rho_R = 1$) y (b) en equilibrio ($\rho_L = 1,5 = \rho_R$). Los símbolos se corresponden con las simulaciones numéricas, las líneas continuas con las predicciones teóricas basadas en la conjetura de aditividad, y las líneas discontinuas a la aproximación gaussiana. Las líneas verticales señalan la transición entre los perfiles monótonos (región interna) y no monótonos de los perfiles óptimos (región externa). Nótese que los perfiles en equilibrio no son monótonos para todas las fluctuaciones de la corriente. Los “inset” de los paneles (a) y (b) miden la relación de Gallavotti-Cohen representando la diferencia $\mu(\lambda) - \mu(-\lambda - 2\epsilon)$ en el caso (a) y $\mu(\lambda) - \mu(-\lambda)$ en el caso (b). Los paneles de la derecha se corresponden al exceso de temperatura en los perfiles para diferentes fluctuaciones de la corriente, (c) para un sistema sujeto a un gradiente de temperatura, ($\rho_L = 2, \rho_R = 1$) y (d) en equilibrio ($\rho_L = 1,5 = \rho_R$). En todos los casos existe un buen acuerdo entre las predicciones teóricas basadas en la hipótesis de aditividad y los resultados numéricos, en el rango de validez del método computacional.

a una difusividad no constante, que depende de la densidad de energía ρ , esto es, a una ley de Fourier no lineal. Asimismo, también generalizaremos la MFT y el principio de aditividad para esta clase general de sistemas disipativos.

Capítulo 3

Una clase general de modelos disipativos

Los sistemas disipativos están presentes en contextos muy diversos, como la biofísica, la materia activa, la electrónica, la combustión, los medios granulares, o las reacciones químicas, por nombrar sólo algunos. Su dinámica mesoscópica está caracterizada por ecuaciones de tipo reacción-difusión, las cuales presentan competición entre los mecanismos de difusión y disipación, que típicamente lleva al sistema fuera del equilibrio. Por consiguiente, es necesaria una inyección de energía en el sistema para mantener un estado estacionario. Por otra parte, las ecuaciones que describen la evolución espacio-temporal de muchos de estos sistemas son altamente no lineales, y sus coeficientes de transporte dependen de la densidad de energía local.

La física de estos sistemas disipativos no lineales es un campo de estudio abierto por varios motivos. Son sistemas intrínsecamente en no equilibrio, y no hay una distribución general que describa la estadística de las configuraciones microscópicas, como es el caso de la distribución de Gibbs para sistemas en equilibrio. Además, hay corrientes de masa o energía inducidas por gradientes locales producidos por la disipación y no únicamente por las condiciones de contorno, como ocurre en los sistemas conservativos en no equilibrio. Además, su dinámica microscópica es típicamente irreversible, lo que añade dificultad a su descripción estadística. En esta sección analizamos una clase general de sistemas, tanto a nivel microscópico como hidrodinámico, cuyas principales características son la difusión, la disipación y la inyección de energía por sus contornos. Esto, junto con el comportamiento no lineal son elementos claves para la modelización de numerosos sistemas disipativos

reales. En nuestra familia de modelos hay una partícula en cada posición de una red d -dimensional, y el estado de cada partícula está completamente caracterizado por su energía. La dinámica es estocástica: los vecinos más próximos colisionan con una probabilidad que depende de la energía del par. En cada colisión se disipa una fracción de la energía del par y la cantidad restante se redistribuye aleatoriamente entre las dos partículas que han colisionado. Por otra parte, el sistema puede estar acoplado a baños térmicos por sus extremos. En el límite de tamaño muy grande, se pueden introducir variables de tiempo y de espacio continuas, así como los ‘los campos hidrodinámicos’: densidad de energía $\rho(x, t)$, corriente $j(x, t)$ y disipación $d(x, t)$. La evolución de la densidad de energía obedece la ecuación (en promedio)

$$\partial_t \rho(x, t) = -\partial_x j(x, t) + d(x, t). \quad (3.1)$$

Debemos señalar que, como veremos en el desarrollo de este capítulo, la dinámica microscópica debe ser cuasielástica para asegurar que la difusión y la disipación tengan lugar en la misma escala de tiempo en el límite continuo.

La clase de modelos introducidos en este capítulo representa a nivel mesoscópico la física de muchos sistemas disipativos de interés, tanto teórico como tecnológico, cuya dinámica está regida por la ecuación (3.1). De hecho, puede considerarse como una generalización del modelo KMP (véase la introducción sec 2.3.3 y también la ref. [37]) para la conducción del calor, en el que se puede obtener explícitamente la ley de Fourier. Este modelo se ha usado como ‘campo de pruebas’ para obtener algunos avances teóricos recientes. Como hemos dicho antes, nuestra clase general de modelos contienen los ingredientes esenciales de la mayoría de los sistemas disipativos, esto es: (i) dinámica difusiva no lineal, (ii) disipación en el ‘bulk’ (seno del sistema) y (iii) inyección de energía por los contornos. Además puede verse como un modelo de juguete para un medio granular denso: las partículas no pueden moverse libremente pero pueden colisionar con sus vecinos más próximos, perdiendo parte de su energía e intercambiando el resto aleatoriamente. En este contexto, el parámetro de inelasticidad que introducimos en la dinámica microscópica se podría identificar con el coeficiente de restitución de los medios granulares.

3.1. Definición de los modelos

3.1.1. Modelo microscópico

Por simplicidad, consideremos el caso unidimensional, siendo la extensión a dimensión arbitraria inmediata. El sistema está definido en una red unidimensional con N sitios. Una configuración en el tiempo p viene dada por $\boldsymbol{\rho} = \{\rho_{l,p}\}$, $l = 1, \dots, N$, donde $\rho_{l,p} \geq 0$ es la energía del sitio l -ésimo en el instante p . Por tanto, la energía total del sistema es $E_p = \sum_{l=1}^N \rho_{l,p}$. La dinámica es estocástica y la describimos a continuación. En un paso elemental, un par de vecinos próximos en las posiciones $(l, l+1)$ colisionan con probabilidad

$$P_{l,p}(\boldsymbol{\rho}) = \frac{f(\Sigma_{l,p})}{\sum_{l'=1}^L f(\Sigma_{l',p})}, \quad \Sigma_{l,p} = \rho_{l,p} + \rho_{l+1,p}, \quad (3.2)$$

q donde f es una función dada de la energía del par $\Sigma_{l,p}$, y L es el número de posibles pares. Claramente $L \sim N$, pero la relación concreta entre L y N depende de las condiciones de contorno consideradas en el problema (por ejemplo, $L = N+1$ para el caso de un sistema abierto y $L = N$ para el caso periódico). Una vez se ha escogido el par, una fracción de su energía, $(1 - \alpha)\Sigma_{l,p}$, se disipa al entorno. La energía restante $\alpha\Sigma_{l,p}$ es distribuida aleatoriamente entre ambos sitios,

$$\rho_{l,p+1} = z_p \alpha \Sigma_{l,p}, \quad \rho_{l+1,p+1} = (1 - z_p) \alpha \Sigma_{l,p}, \quad (3.3)$$

siendo z_p un número aleatorio distribuido homogéneamente en el intervalo $[0, 1]$. Esta dinámica define la evolución de los pares distintos a los de los extremos ($l = 1, \dots, N - 1$), que denominamos de “bulk”. Además, y dependiendo de las condiciones de contorno impuestas, los sitios de los extremos pueden interactuar con baños térmicos, de temperaturas T_L (izquierda) y T_R (derecha). Para estos pares, la dinámica es

$$\rho_{1,p+1} = z_p \alpha (e_{1,p} + \tilde{e}_L), \quad \rho_{N,p+1} = z_p \alpha (e_{N,p} + \tilde{e}_R), \quad (3.4)$$

cuando el primero o el último sitio interactúan con el vecino próximo correspondiente al baño térmico. Aquí \tilde{e}_ν , $\nu = L, R$, es una energía escogida aleatoriamente en cada instante de una distribución canónica a temperatura T_ν , es decir, con probabilidad $\text{prob}(\tilde{e}_\nu) = T_\nu^{-1} \exp(-\tilde{e}_\nu/T_\nu)$,¹ véase la fig. 3.1. Por otra parte, podemos también considerar un sistema aislado con condiciones de contorno periódicas, tal

¹nuestra temperatura unidad está fijada haciendo $k_B = 1$.



FIGURA 3.1: Esquema de la clase de modelos de red monodimensionales descrita en el texto. La variable ρ_l denota la energía del sitio l -ésimo, $l = 1, \dots, N$, y T_L y T_R son las temperaturas de los baños térmicos a los que se encuentra acoplado el sistema. La dinámica es estocástica y consiste en colisiones aleatorias entre pares de vecinos más próximos, en las que parte de la energía se disipa al entorno y el resto se redistribuye aleatoriamente dentro del par.

que $L = N$ y las ecuaciones (3.2) y (3.3) siguen siendo válidas para $l = 0$ ($l = N$) reemplazando $\rho_{0,p} = \rho_{N,p}$ ($\rho_{N+1,p} = \rho_{1,p}$).

La situación más sencilla corresponde a la elección $f(\Sigma_{l,p}) = 1$ en la ecuación (3.2). En este caso todos los pares (de vecinos más próximos) chocan con la misma probabilidad $P_{l,p} = L^{-1}$, independientemente de su energía. Esta elección es similar a la realizada en la teoría cinética de los gases para definir las denominadas moléculas de Maxwell [40], y en el caso elástico ($\alpha = 1$) corresponde al modelo de Kipnis-Marchioro-Presutti (KMP) de conducción del calor (introducción sec. 2.3.3). El modelo KMP proporciona una descripción cualitativa de una clase general de sistemas difusivos unidimensionales [37], y se ha usado para investigar la validez del principio de aditividad para las fluctuaciones de la corriente [27], el teorema de fluctuación de Gallavotti-Cohen [32] y sus generalizaciones [28, 36]. Otro ejemplo simple, pero físicamente relevante, es $f(\Sigma_{l,p}) = \Sigma_{l,p}$, de forma que $P_{l,p} \sim \Sigma_{l,p}/(2E_p)$ para sistemas grandes. Se ha usado recientemente una variante de este modelo para estudiar la propagación de ondas compactas en un problema de difusión microscópica no lineal [41]. En general, típicamente esperamos que $P_{l,p} \propto L^{-1}$, como sucede en los dos casos particulares que hemos descrito. Esto se debe a que el denominador de la ecuación (3.2), que es la suma de L términos, será extensivo para una configuración típica. Por consiguiente, es conveniente escribir

$$P_{l,p}(\boldsymbol{\rho}) = \frac{f(\Sigma_{l,p})}{L\Omega_p(L)}, \quad \Omega_p(L) \equiv \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L f(\Sigma_{l,p}), \quad (3.5)$$

de modo que $\Omega_p(L)$ permanece finito cuando $L \rightarrow \infty$. A lo largo de esta sección, analizaremos el proceso estocástico que genera la dinámica (3.2)-(3.3) con sus condiciones de contorno correspondientes. Éstas vendrán dadas por la ecuación (3.4), si el sistema está en contacto con un baño térmico en cada uno de sus extremos.

Nótese que la energía se conserva en la dinámica para $\alpha = 1$, mientras que parte de ella se disipa continuamente para cualquier $0 \leq \alpha < 1$. De esta forma, el parámetro α se puede considerar como el análogo al coeficiente de restitución utilizado para parametrizar la inelasticidad de las colisiones en los medios granulares. Así, en un sistema aislado (sin inyección de energía) la energía decrece monótonamente en el tiempo. Sin embargo, si se inyecta energía (por ejemplo, acoplando baños térmicos a los extremos, como hemos descrito antes) se alcanza un estado estacionario donde esta inyección de energía compensa la disipación en las colisiones. En el caso conservativo $\alpha = 1$, las probabilidades de transición antes introducidas verifican balance detallado con la distribución microcanónica, es decir, la distribución que da igual probabilidad para todos los microestados compatibles con la energía total del sistema E . Esto implica que un sistema cerrado se aproximará a la distribución de equilibrio microcanónica para cualquier elección de la función f que aparece en las probabilidades de transición. Así, un subsistema pequeño, compuesto por $n \ll N$ sitios consecutivos, está descrito por la distribución canónica, cuya temperatura está determinada por el resto del sistema, que actúa como un reservorio térmico. De esta forma, en una situación donde existan gradientes, es razonable desde un punto de físico que el sistema se aproxime a la distribución de “equilibrio local”. Esto es, en primer lugar el sistema tiende a un estado en que la distribución de probabilidades de un subsistema viene dada por la distribución de equilibrio correspondiente a la densidad de energía (temperatura) local. Sobre una escala de tiempo mucho más lenta, la escala hidrodinámica, esta densidad de energía evoluciona al estado estacionario compatible con las condiciones de contorno del sistema. La validez de esta imagen se ha demostrado para un conjunto amplio de sistemas monodimensionales [42].

3.2. Límite continuo (Hidrodinámica)

La dinámica definida en las ecuaciones (3.3) la podemos escribir como

$$\begin{aligned} \rho_{l,p+1}^{(\kappa)} &= \rho_{l,p}^{(\kappa)} \left(1 - \delta_{y_p^{(\kappa)},l} - \delta_{y_p^{(\kappa)},l-1} \right) + z_p^{(\kappa)} \alpha \left(\rho_{l,p}^{(\kappa)} + \rho_{l+1,p}^{(\kappa)} \right) \delta_{y_p^{(\kappa)},l} \\ &\quad + (1 - z_p^{(\kappa)}) \alpha \left[\rho_{l-1,p}^{(\kappa)} + \rho_{l,p}^{(\kappa)} \right] \delta_{y_p^{(\kappa)},l-1} \end{aligned} \quad (3.6)$$

para cada realización (o trayectoria) κ del proceso estocástico. Aquí $\delta_{i,j}$ es la delta de Kronecker, $z_p^{(\kappa)}$ un número aleatorio homogéneamente distribuido en $[0, 1]$ que controla el intercambio de energía local e $y_p^{(\kappa)} \in [1, L]$ es un entero aleatorio independiente que selecciona el par de vecinos más próximos que colisionan. La

probabilidad condicionada de que y_p sea igual a l , para cierta configuración dada ρ , es igual a $P_{l,p}(\rho)$,

$$\langle \delta_{y_p, l} \rangle_{\rho} = \frac{f(\Sigma_{l,p})}{L\Omega_p(L)}, \quad (3.7)$$

de acuerdo con las ecuaciones (3.2) o (3.5). El segundo término de la ec. (3.6) proporciona la densidad en el sitio l en el paso de tiempo $p + 1$ cuando se escoge en par l -ésimo ($l, l + 1$) en el instante p , mientras que el tercero corresponde a la elección del par ($l - 1, l$). Por otra parte, si no se escoge uno de estos pares, la densidad del sitio l permanece invariable, lo que viene dado por el primer término de dicha ecuación.

La corriente de energía involucrada en una colisión del par ($l, l + 1$) la denotaremos por $j_{l,p}$, y es justo la energía neta que se transporta por unidad de tiempo hacia la derecha, una vez que la colisión ha tenido lugar. Matemáticamente, de nuevo para cada trayectoria κ del sistema, la corriente $j_{l,p}^{(\kappa)}$ del nudo l al nudo $l + 1$ es

$$j_{l,p}^{(\kappa)} = (\alpha\rho_{l,p}^{(\kappa)} - \rho_{l,p+1}^{(\kappa)})\delta_{y_p^{(\kappa)}, l} = \alpha \left[(1 - z_p^{(\kappa)})\rho_{l,p}^{(\kappa)} - z_p^{(\kappa)}\rho_{l+1,p}^{(\kappa)} \right] \delta_{y_p^{(\kappa)}, l}. \quad (3.8)$$

donde hemos usado en la segunda igualdad la ecuación (3.3). Sólo hay corriente entre los nudos l y $l + 1$ cuando colisiona dicho par. De forma equivalente, se define la energía disipada en la *posición* l y en el tiempo p sobre cada trayectoria como

$$d_{l,p}^{(\kappa)} = -(1 - \alpha)\rho_{l,p}^{(\kappa)} \left(\delta_{y_p^{(\kappa)}, l} + \delta_{y_p^{(\kappa)}, l-1} \right). \quad (3.9)$$

cuando el par que colisiona es ($l, l + 1$) o ($l - 1, l$). Nótese que, al contrario que en el término de corriente, la disipación se define para cada sitio en lugar de para cada par ($l, l + 1$). Esta definición simplifica el análisis que sigue y tiene sentido físico: la corriente corresponde a un flujo de energía entre sitios. Haciendo uso de las definiciones de la corriente y la disipación, la ecuación de evolución (3.6) la podemos reescribir en la forma,

$$\rho_{l,p+1}^{(\kappa)} - \rho_{l,p}^{(\kappa)} = j_{l-1,p}^{(\kappa)} - j_{l,p}^{(\kappa)} + d_{l,p}^{(\kappa)}, \quad (3.10)$$

que se corresponde a una ecuación de reacción difusión discreta, con una contribución difusiva $j_{l-1,p} - j_{l,p}$ y un término de pérdida $d_{l,p}$. Este último es proporcional a $1 - \alpha$, y se anula en el caso elástico $\alpha = 1$.

La ecuación de evolución hidrodinámica (o promedio), se obtiene sumando sobre todas las posibles trayectorias del sistema κ . Es decir si A es cierta propiedad física del sistema, $\langle A \rangle = \sum_{\kappa=1}^{N_T} A^{(\kappa)} / N_T$, donde $A^{(\kappa)}$ es el valor de A en la κ -ésima

realización del proceso estocástico, y el número de trayectorias $N_T \rightarrow \infty$. Este procedimiento es equivalente a promediar sobre todas las posibles secuencias de los pares de números aleatorios (z_p, y_p) que determinan la dinámica microscópica. Dicho esto, y con objeto de no complicar nuestras fórmulas, omitimos el superíndice κ en el resto de secciones, así todas las expresiones en las que aparezca el par de números aleatorios (z_p, y_p) son válidas para cada trayectoria del sistema. Promediando de esta forma en la ecuación (3.10) se obtiene que

$$\langle \rho_{l,p+1} - \rho_{l,p} \rangle = \langle j_{l-1,p} - j_{l,p} \rangle + \langle d_{l,p} \rangle. \quad (3.11)$$

Vamos a considerar primero el valor promedio de la corriente de energía. De la ecuación (3.8),

$$\langle j_{l,p} \rangle = \frac{\alpha}{2L} \left\langle \frac{(\rho_{l,p} - \rho_{l+1,p}) f(\Sigma_{l,p})}{\Omega_p(L)} \right\rangle, \quad (3.12)$$

donde hemos tenido en cuenta la ecuación (3.7) y $\langle z_p \rangle = 1/2$. Por otro lado, el valor promedio de la disipación es

$$\langle d_{l,p} \rangle = -\frac{1-\alpha}{L} \left\langle \rho_{l,p} \left[\frac{f(\Sigma_{l,p}) + f(\Sigma_{l-1,p})}{\Omega_p(L)} \right] \right\rangle \quad (3.13)$$

En el límite de tamaño grande $L \rightarrow \infty$, estamos interesados en los campos de densidad, corriente y disipación, que serán funciones suaves de la variable espacial continua

$$x = \frac{l}{L} - \frac{1}{2}, \quad \Delta x \equiv x_{l+1} - x_l = \frac{1}{L} \ll 1, \quad (3.14)$$

con $x \in [-1/2, 1/2]$. En este límite continuo, la densidad promedio $\langle \rho_{l,p} \rangle$ se reemplazará por $\rho_{\text{av}}(x, t)$,

$$\langle \rho_{l,p} \rangle \rightarrow \rho_{\text{av}}(x, t), \quad (3.15)$$

donde t es un tiempo continuo que se introducirá mas adelante. Por otro lado, debido a que tenemos una *derivada discreta* dentro del promedio en (3.12), esperamos que $\langle j_{l,p} \rangle$ escale como L^{-2} ,

$$\langle j_{l,p} \rangle \rightarrow L^{-2} \tau_p j_{\text{av}}(x, t), \quad (3.16a)$$

$$\tau_p = \lim_{L \rightarrow \infty} \langle \Omega_p^{-1}(L) \rangle. \quad (3.16b)$$

Por conveniencia, hemos introducido τ_p , porque $\langle \Omega_p^{-1}(L) \rangle$ tiene límite finito cuando $L \rightarrow \infty$, como discutimos anteriormente. El parámetro τ_p determina una escala de tiempo microscópica, independiente de L , pero que depende de la elección de la función de probabilidad de colisión $f(\Sigma)$. Para el caso más sencillo, en que $f(\Sigma) = 1$

(KMP o moléculas de Maxwell), tenemos que $\tau_p = 1$. Siguiendo esta discusión, el término difusivo en la ecuación de evolución para la densidad promedio (3.11), $\langle j_{l-1,p} - j_{l,p} \rangle$, debería escalar como L^{-3} ,

$$\langle j_{l-1,p} - j_{l,p} \rangle \rightarrow -L^{-3} \tau_p \partial_x j_{av}(x, t). \quad (3.17)$$

Finalmente, el término disipativo $\langle d_{l,p} \rangle$ en la ecuación (3.13) escala como $(1 - \alpha)L^{-1}$. Por tanto el término difusivo debería despreciarse en el límite termodinámico, a menos que el coeficiente de disipación microscópica escale como $1 - \alpha \propto L^{-2}$. De hecho, este es el escalamiento correcto para la “inelasticidad” microscópica $1 - \alpha$ en el límite de tamaño grande, siendo la única que garantiza que la difusión y la disipación actúen en la misma escala de tiempo a nivel mesoscópico [43]. Así,

$$\langle d_{l,p} \rangle \rightarrow L^{-3} \tau_p d_{av}(x, t), \quad 1 - \alpha \equiv \frac{\nu}{2L^2}, \quad (3.18)$$

donde ν es el coeficiente de disipación “mesoscópico” que permanece finito en el límite $L \rightarrow \infty$. La ecuación (3.18) implica que la dinámica microscópica es cuasielástica, lo que simplifica ciertos aspectos del problema, como veremos a lo largo de los próximos apartados.

3.2.1. Aproximación de equilibrio local

Con objeto de ser más concretos, hemos evaluado los promedios del segundo miembro de las ecuaciones (3.12) y (3.13). Esto se puede hacer usando la “aproximación de equilibrio local”, que esperamos que sea válida en el límite termodinámico [21, 44]. Para sistemas de tamaño grande, aparece una separación clara de escalas de tiempo entre la escala (del orden de varias veces τ_p) sobre la que el sistema se aproxima localmente a la distribución de equilibrio local (es decir, el producto de medidas de Gibbs con *temperaturas* $\langle \rho_{l,p} \rangle$) y la escala de tiempo mucho mayor sobre la que el promedio de la densidad evoluciona siguiendo la ecuación hidrodinámica.

Los promedios que aparecen en esta tesis, a partir de los cuales calculamos los comportamientos hidrodinámicos de las diferentes magnitudes de interés, corriente, densidad y disipación, son de la forma general

$$\left\langle \frac{g(\rho_{l,p}, \rho_{l+1,p}) f(\Sigma_{l,p})}{\Omega_p(L)} \right\rangle \quad (3.19)$$

donde $g(\rho_{l,p}, \rho_{l+1,p})$ son diferentes funciones de las energías $\{\rho_{l,p}, \rho_{l+1,p}\}$, mientras que $\Sigma_{l,p}$ y $\Omega_p(L)$ las hemos definido en las ecuaciones (3.2) y (3.5) respectivamente. Por lo tanto,

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{g(\rho_{l,p}, \rho_{l+1,p})f(\rho_{l,p} + \rho_{l+1,p})}{\Omega_p(L)} \right\rangle &= \int_0^\infty d\rho_l \int_0^\infty d\rho_{l+1} g(\rho_l, \rho_{l+1})f(\rho_l + \rho_{l+1})P(\rho_l, \rho_{l+1}; p) \\ &\times \int_0^\infty d\rho_1 \cdots \int_0^\infty d\rho_{l-1} \int_0^\infty d\rho_{l+2} \int_0^\infty d\rho_N \frac{P(\rho_1, \dots, \rho_{l-1}, \rho_{l+2}, \dots, \rho_N | \rho_l, \rho_{l+1}; p)}{\Omega(L)}. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Hemos usado el teorema de Bayes para escribir esta ecuación: la probabilidad de que el sistema esté en una configuración $\boldsymbol{\rho} = \{\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_N\}$ en el paso de tiempo p es $P(\rho_l, \rho_{l+1}; p)P(\rho_1, \dots, \rho_{l-1}, \rho_{l+2}, \dots, \rho_N | \rho_l, \rho_{l+1}; p)$; donde $P(\rho_l, \rho_{l+1}; p)$ es la probabilidad de encontrar a las posiciones l y $l+1$ en el instante p con energía ρ_l y ρ_{l+1} respectivamente, independientemente de la configuración de las restantes posiciones, y $P(\rho_1, \dots, \rho_{l-1}, \rho_{l+2}, \dots, \rho_N | \rho_l, \rho_{l+1}; p)$ es la probabilidad condicionada de encontrar a los sitios restantes en la configuración $\{\rho_1, \dots, \rho_{l-1}, \rho_{l+2}, \dots, \rho_N\}$ en el instante p , dado que los sitios l y $l+1$ tienen energías ρ_l y ρ_{l+1} , respectivamente.

Primero vamos a calcular la integral sobre $\{\rho_1, \dots, \rho_{l-1}, \rho_{l+2}, \dots, \rho_N\}$ en la ecuación (3.20). De la definición de $\Omega_p(L)$, Eq. (3.5),

$$\begin{aligned} \Omega(L) &= \frac{1}{L} \left[\sum_{\nu=1}^{l-2} f(\rho_\nu + \rho_{\nu+1}) + f(\rho_{l-1} + \rho_{l+2}) + \sum_{\nu=l+2}^L f(\rho_\nu + \rho_{\nu+1}) \right] \\ &+ \frac{1}{L} \left[\sum_{\nu=l-1}^{l+1} f(\rho_\nu + \rho_{\nu+1}) - f(\rho_{l-1} + \rho_{l+2}) \right]. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Nótese que en la ecuación (3.21), escribimos $\Omega(L)$ y ρ , omitiendo el subíndice correspondiente al paso de tiempo p . Esto es así porque insertamos la ecuación (3.21) en (3.20), donde las variables de integración $\{\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_N\}$ son mudas, y la dependencia temporal aparece en las distribuciones de probabilidad. De hecho, también hemos usado esta notación en la ecuación (3.20) para $\Omega_p(L)$, pero también para las funciones g y f . La ecuación (3.21) implica que

$$\Omega(L) = \frac{L-2}{L} \Omega^*(L-2) + \frac{1}{L} \left[\sum_{\nu=l-1}^{l+1} f(\rho_\nu + \rho_{\nu+1}) - f(\rho_{l-1} + \rho_{l+2}) \right], \quad (3.22)$$

donde $\Omega^*(L-2)$ corresponde a un sistema de tamaño $L-2$, sin las posiciones l y $l+1$. La ecuación (3.22) sugiere que, en el límite de tamaño muy grande,

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty d\rho_1 \cdots \int_0^\infty d\rho_{l-1} \int_0^\infty d\rho_{l+2} \cdots \int_0^\infty d\rho_N \Omega^{-1}(L) P(\rho_1, \dots, \rho_{l-1}, \rho_{l+2}, \dots, \rho_N | \rho_l, \rho_{l+1}; p) \\ & \sim \langle \Omega_p^{*-1}(L-2) \rangle \sim \tau_p, \end{aligned} \quad (3.23)$$

ya que $\tau_p = \langle \Omega_p^{-1}(L) \rangle$ para $L \rightarrow \infty$, como definimos en la ecuación (3.16b). El subíndice p reaparece en τ_p , porque el valor promedio está calculado en el instante p , con la distribución de probabilidad $P(\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_N; p)$. Físicamente, podemos entender el resultado (3.23) como que (i) para una configuración típica, $\Omega(L) \sim \Omega^*(L-2)$, su diferencia es de orden L^{-1} (ii) los sitios $(l, l+1)$ en (3.23) actúan como unas condiciones de contorno “extra”, que no afectan el valor medio para $L \rightarrow \infty$. Así, sustituyendo la ecuación (3.23) en (3.20),

$$\left\langle \frac{g(\rho_{l,p}, \rho_{l+1,p}) f(\rho_{l,p} + \rho_{l+1,p})}{\Omega_p(L)} \right\rangle \sim \tau_p \langle g(\rho_{l,p}, \rho_{l+1,p}) f(\rho_{l,p} + \rho_{l+1,p}) \rangle. \quad (3.24)$$

Este es un resultado importante y que vamos a usar repetidamente en el desarrollo de esta tesis, ya que simplifica mucho los cálculos. Para seguir avanzando, tenemos que calcular el promedio

$$\langle g(\rho_{l,p}, \rho_{l+1,p}) f(\rho_{l,p} + \rho_{l+1,p}) \rangle = \int_0^\infty d\rho_l \int_0^\infty d\rho_{l+1} g(\rho_l, \rho_{l+1}) f(\rho_l + \rho_{l+1}) P(\rho_l, \rho_{l+1}; p), \quad (3.25)$$

para lo que necesitamos conocer la función de distribución $P(\rho_l, \rho_{l+1}; p)$. En este punto, y para calcular estos promedios, introducimos la *aproximación de equilibrio local*, es decir, asumimos que la distribución de probabilidad $P(\rho_l, \rho_{l+1}; p)$ dentro de la integral en la ecuación (3.25) se puede sustituir por

$$P_{\text{LE}}(\rho_l, \rho_{l+1}; p) = \frac{1}{\langle \rho_{l,p} \rangle \langle \rho_{l+1,p} \rangle} \exp\left(-\frac{\rho_l}{\langle \rho_{l,p} \rangle} - \frac{\rho_{l+1}}{\langle \rho_{l+1,p} \rangle}\right). \quad (3.26)$$

Esta hipótesis de equilibrio local, nos permite calcular expresiones para los promedios en términos de las densidades locales de energía $\langle \rho_{l,p} \rangle$ y $\langle \rho_{l+1,p} \rangle$. Además, asumiremos cuando sea necesario que $\langle \rho_{l+1,p} - \rho_{l,p} \rangle = \mathcal{O}(L^{-1})$, lo que es consistente con el límite continuo introducido en la sección 3.2. El promedio en la ecuación (3.25) se convierte en un funcional del campo de densidad de energía $\rho_{\text{av}}(x, t)$, ya que

$$\langle \rho_{l+1,p} \rangle = \langle \rho_{l,p} \rangle + L^{-1} \frac{\langle \rho_{l+1,p} - \rho_{l,p} \rangle}{\Delta x} \sim \rho_{\text{av}}(x, t) + L^{-1} \partial_x \rho_{\text{av}}(x, t). \quad (3.27)$$

Hemos utilizado que

$$\frac{\langle \rho_{l+1,p} - \rho_{l,p} \rangle}{\Delta x} \sim \partial_x \rho_{\text{av}}(x, t) \quad (3.28)$$

en el límite continuo de espacio y tiempo que estamos considerando en esta sección.

Para calcular la corriente promedio nuestro punto de partida es la ecuación (3.12), y aplicando (3.24) llegamos a

$$\langle j_{l,p} \rangle = \frac{\alpha}{2L} \left\langle \frac{(\rho_{l,p} - \rho_{l+1,p}) f(\Sigma_{l,p})}{\Omega_p(L)} \right\rangle \sim \frac{\alpha}{2L} \tau_p \langle (\rho_{l,p} - \rho_{l+1,p}) f(\Sigma_{l,p}) \rangle, \quad (3.29)$$

Ahora, tenemos que evaluar el promedio $\langle (\rho_{l,p} - \rho_{l+1,p}) f(\Sigma_{l,p}) \rangle$ en la *aproximación de equilibrio local*. Tenemos que, por definición, usando (3.26)

$$\begin{aligned} \langle (\rho_{l,p} - \rho_{l+1,p}) f(\Sigma_{l,p}) \rangle_{\text{LE}} &= \frac{1}{\langle \rho_{l,p} \rangle \langle \rho_{l+1,p} \rangle} \int_0^\infty d\rho_l \int_0^\infty d\rho_{l+1} (\rho_l - \rho_{l+1}) f(\rho_l + \rho_{l+1}) \\ &\quad \times \exp\left(-\frac{\rho_l}{\langle \rho_{l,p} \rangle} - \frac{\rho_{l+1}}{\langle \rho_{l+1,p} \rangle}\right). \end{aligned} \quad (3.30)$$

Sustituimos (3.27) en la ecuación anterior, y desarrollamos hasta orden L^{-1} , que es el dominante, ya que la contribución de orden cero,

$$\int_0^\infty d\rho_l \int_0^\infty d\rho_{l+1} (\rho_l - \rho_{l+1}) f(\rho_l + \rho_{l+1}) \exp\left(-\frac{\rho_l + \rho_{l+1}}{\rho_{\text{av}}}\right) = 0, \quad (3.31)$$

debido a la simetría del integrando ante el intercambio $\rho_l \leftrightarrow \rho_{l+1}$. Por consiguiente, hasta primer orden en L^{-1} ,

$$\begin{aligned} \langle (\rho_{l,p} - \rho_{l+1,p}) f(\Sigma_{l,p}) \rangle_{\text{LE}} &\sim -L^{-1} \frac{\partial_x \rho_{\text{av}}}{\rho_{\text{av}}^3} \int_0^\infty d\rho_l \int_0^\infty d\rho_{l+1} (\rho_l - \rho_{l+1}) \left(1 - \frac{\rho_{l+1}}{\rho_{\text{av}}}\right) \\ &\quad \times f(\rho_l + \rho_{l+1}) \exp\left(-\frac{\rho_l + \rho_{l+1}}{\rho_{\text{av}}}\right) \end{aligned} \quad (3.32)$$

Intercambiando las variables mudas de integración ρ_l y ρ_{l+1} , obtenemos una expresión similar a la anterior. Promediando las dos expresiones equivalentes, obtenemos

$$\begin{aligned} \langle (\rho_{l,p} - \rho_{l+1,p}) f(\Sigma_{l,p}) \rangle_{\text{LE}} &\sim -L^{-1} \frac{\partial_x \rho_{\text{av}}}{2\rho_{\text{av}}^4} \int_0^\infty d\rho_l \int_0^\infty d\rho_{l+1} (\rho_l - \rho_{l+1})^2 f(\rho_l + \rho_{l+1}) e^{-\frac{\rho_l + \rho_{l+1}}{\rho_{\text{av}}}} \\ &= -L^{-1} \frac{\partial_x \rho_{\text{av}}}{2} \int_0^\infty dx \int_0^\infty dy (x - y)^2 f(\rho_{\text{av}}(x + y)) e^{-(x+y)}. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Para obtener la última igualdad en la ecuación (3.33), hemos introducido el cambio de variables $\rho_l = \rho_{\text{av}}x$, $\rho_{l+1} = \rho_{\text{av}}y$. Podemos simplificar esta expresión utilizando

coordenadas polares (r, ϕ) , y definir $x = a^2$, $y = b^2$, con $a = r \cos \phi$, $b = r \sin \phi$. Así, podemos realizar la integral sobre la variable angular ϕ , con el siguiente resultado:

$$\langle (\rho_{l,p} - \rho_{l+1,p}) f(\Sigma_{l,p}) \rangle_{\text{LE}} = -\frac{\partial_x \rho_{\text{av}}}{3L} \int_0^\infty dr r^7 f(\rho_{\text{av}} r^2) e^{-r^2}. \quad (3.34)$$

Por lo tanto, usando la *aproximación de equilibrio local*, la ecuación (3.29), se transforma en

$$\langle j_{l,p} \rangle \sim -L^{-2} \tau_p D(\rho_{\text{av}}) \partial_x \rho_{\text{av}}, \quad (3.35)$$

donde la difusividad $D(\rho)$ está dada por

$$D(\rho) = \frac{1}{6} \int_0^\infty dr r^7 f(\rho r^2) e^{-r^2}. \quad (3.36)$$

La ecuación (3.35) es por tanto consistente con el escalamiento supuesto en la ecuación (3.16a). Además,

$$j_{\text{av}}(x, t) = -D(\rho_{\text{av}}) \partial_x \rho_{\text{av}}, \quad (3.37)$$

esto es, se cumple la ley de Fourier con “difusividad” $D(\rho_{\text{av}})$.

Por otro lado, para calcular la disipación promedio, partimos de la ecuación (3.13) para la disipación,

$$\langle d_{l,p} \rangle = \frac{1-\alpha}{L} \left\langle \rho_{l,p} \left[\frac{f(\Sigma_{l,p}) + f(\Sigma_{l-1,p})}{\Omega_p(L)} \right] \right\rangle \sim \frac{1-\alpha}{L} \tau_p \langle \rho_{l,p} [f(\Sigma_{l,p}) + f(\Sigma_{l-1,p})] \rangle, \quad (3.38)$$

donde hemos usado de nuevo la ecuación (3.24). De la misma forma que antes, calculamos ahora el promedio $\langle \rho_{l,p} [f(\Sigma_{l,p}) + f(\Sigma_{l-1,p})] \rangle$ en la aproximación de equilibrio local. De hecho, tenemos ahora un caso más sencillo, puesto que este promedio es del orden de la unidad en el límite de tamaño grande. Con el mismo procedimiento seguido antes, se obtiene que

$$\langle \rho_{l,p} [f(\Sigma_{l,p}) + f(\Sigma_{l-1,p})] \rangle_{\text{LE}} = \rho_{\text{av}} \int_0^\infty dx \int_0^\infty dy (x+y) f(\rho_{\text{av}}(x+y)) e^{-(x+y)} \quad (3.39)$$

Como hicimos al deducir la ecuación (3.33), hemos tenido en cuenta $\langle \rho_{l+1,p} \rangle \sim \langle \rho_{l,p} \rangle \rightarrow \rho_{\text{av}}(x, t)$, la ec. (3.27), e introducido el cambio de variable $\rho_l = \rho_{\text{av}} x$, $\rho_{l+1} = \rho_{\text{av}} y$. Ahora, realizando el mismo cambio de variable a coordenadas polares,

y la integral sobre la variable angular, llegamos a

$$\langle \rho_{l,p} [f(\Sigma_{l,p}) + f(\Sigma_{l-1,p})] \rangle_{\text{LE}} = 2\rho_{\text{av}} \int_0^\infty dr r^5 f(\rho_{\text{av}} r^2) e^{-r^2}. \quad (3.40)$$

Esto implica, teniendo en cuenta la ec. (3.38), que

$$\langle d_{l,p} \rangle \sim -L^{-3} \tau_p \nu R(\rho_{\text{av}}), \quad (3.41)$$

con

$$R(\rho) = \rho \int_0^\infty dr r^5 f(\rho r^2) e^{-r^2}. \quad (3.42)$$

De nuevo, al ec. (3.41) es consistente con el escalamiento asumido en (3.18), con

$$d_{\text{av}}(x, t) = -\nu R(\rho_{\text{av}}) \quad (3.43)$$

Es interesante observar que el nuevo coeficiente de transporte $R(\rho)$, asociado a la disipación, se puede relacionar con la difusividad. Derivando en la ec. (3.42) con respecto a ρ , y haciendo después del cambio de variables de integración $z = r\sqrt{\rho}$, encontramos que

$$D(\rho) = \frac{1}{6} \frac{dR(\rho)}{d\rho} + \frac{R(\rho)}{3\rho}. \quad (3.44)$$

De hecho, dado la difusividad, esta ecuación puede considerarse una ecuación diferencial de primer orden para $R(\rho)$. Su solución, con las condiciones de contorno apropiadas (normalmente $R(\rho = 0) = 0$), es equivalente a calcular la integral (3.42). Ahora podemos reescribir la ecuación (3.11) en la forma,

$$\langle \rho_{l,p+1} - \rho_{l,p} \rangle = -L^{-3} \tau_p \partial_x j_{\text{av}}(x, t) - L^{-3} \tau_p \nu R(\rho_{\text{av}}), \quad (3.45)$$

usando las ecs. (3.41) y (3.17). Esta ecuación sugiere la introducción de un tiempo hidrodinámico (o macroscópico) t , tal que su incremento en el paso p viene dado por

$$\Delta t_p = L^{-3} \tau_p, \quad t = \sum_{j=0}^{p-1} \Delta t_j = L^{-3} \sum_{j=0}^{p-1} \tau_j. \quad (3.46)$$

Así, la ecuación (3.45) es equivalente a

$$\partial_t \rho_{\text{av}}(x, t) = -\partial_x j_{\text{av}}(x, t) + d_{\text{av}}(x, t), \quad (3.47)$$

donde la corriente promedio $j_{\text{av}}(x, t)$ verifica la ley de Fourier con difusividad $D(\rho_{\text{av}})$, ecs (3.36)-(3.37), y la disipación promedio $d_{\text{av}}(x, t)$ esta dada en términos

del campo de densidad por las ecs. (3.42)-(3.43).

Las condiciones de contorno para la ec. (3.47) dependen de la situación física que estemos considerando. Por ejemplo, podemos considerar un sistema en contacto con dos baños térmicos en $x = \pm 1/2$, a la misma temperatura T , de manera que $\rho(x = \pm 1/2, t) = T$. En ese caso, el sistema alcanzará un estado estacionario en el límite de tiempos grandes, para el cual la inyección de energía a través de los contornos y la disipación en el "bulk" se compensan entre si. La solución (macroscópica) para los promedios de (3.47) verifica

$$j'_{av}(x) + \nu R(\rho_{av}(x)) = 0, \quad j_{av}(x) = -D(\rho_{av}(x))\rho'_{av}(x), \quad (3.48)$$

donde las primas indican derivada espacial. La primera igualdad en la ecuación (3.48) se sigue de (3.47), mientras que la segunda es la ley de Fourier para la corriente. De esta manera, podemos escribir una ecuación de segundo orden para ρ ,

$$\frac{d}{dx} [D(\rho_{av})\rho'_{av}] = \nu R(\rho_{av}), \quad (3.49)$$

con las condiciones de contorno $\rho_{av}(\pm 1/2) = T$. Para resolver la ec. (3.49), podemos introducir un campo auxiliar $y(x, t)$ que además nos será de utilidad más adelante,

$$y = R(\rho), \quad (3.50a)$$

tal que

$$d(x, t) = -\nu y(x, t). \quad (3.50b)$$

Las ecuaciones (3.48) y (3.49) en la nueva variable $y(x, t)$ son,

$$j'_{av}(x) + \nu y_{av}(x) = 0, \quad j_{av}(x) = -\hat{D}(y_{av}(x))y'_{av}(x), \quad (3.51)$$

con

$$\hat{D}(y) = \left(\frac{dy}{d\rho}\right)^{-1} D(\rho) = \left(\frac{dR(\rho)}{d\rho}\right)^{-1} D(\rho). \quad (3.52)$$

Así, \hat{D} actúa como una difusividad "efectiva", es decir, es el factor que multiplica al gradiente espacial cuando escribimos la ley de Fourier en la variable y . Teniendo en cuenta la ec. (3.44),

$$\hat{D}(y) = \frac{1}{6} + \frac{1}{3} \frac{d \ln \rho(y)}{d \ln y}. \quad (3.53)$$

Es importante señalar que \hat{D} es constante, independiente de y , siempre que $y = R(\rho)$ dependa algebraicamente de ρ . Esta observación será muy útil en la sección 3.3, donde estudiaremos en detalle una familia particular de modelos. La ec. (3.51)

también puede escribirse como una ecuación de segundo orden para y_{av} ,

$$\left[\hat{D}(y_{av})y'_{av} \right]' = \nu y_{av}, \quad y_{av}(\pm 1/2) = R(T), \quad (3.54)$$

De aquí se obtiene la solución promedio para el campo de densidad en la situación física de interés. Cuando \hat{D} es constante, la ec. (3.54) es lineal en y y puede integrarse de manera inmediata.

En el contexto de los sistemas conservativos de partículas interaccionantes se puede encontrar una prueba rigurosa de la *aproximación de equilibrio local* [42, 44]. Su extensión aquí al caso disipativo se basa en que la dinámica microscópica es cuasielástica. Además, la validez de esta aproximación será confirmada *a posteriori* mediante la comparación de nuestras predicciones teóricas con las simulaciones numéricas que presentamos en la subsección siguiente 3.3.

3.3. Ecuaciones de los promedios. Soluciones analíticas y numéricas

Ahora aplicamos la teoría desarrollada en el capítulo anterior a una clase amplia de modelos disipativos. Más concretamente, nos restringimos a la siguiente elección del ritmo de colisión,

$$f(\rho) = \frac{2}{\Gamma(\beta + 3)} \rho^\beta, \quad (3.55)$$

es decir, $f(\rho) \propto \rho^\beta$, con $\beta > -3$ pero arbitrario. Hemos introducido la constante $2/\Gamma(\beta + 3)$ por conveniencia, ya que simplifica las expresiones de los coeficientes de transporte. Para $\beta = 0$, $f(\rho) = 1$ y todos los pares son elegidos con idéntica probabilidad, independientemente de su energía. Así, tenemos una generalización al caso disipativo del modelo KMP [45]. Para $\beta = 1$, $f(\rho) = \rho/3$ y se elige el par que colisiona con probabilidad proporcional a su energía. El caso conservativo ha sido estudiado recientemente en [41].

Para esta familia de modelos, los coeficientes de transporte se calculan fácilmente. El nuevo coeficiente de transporte relacionado con la disipación, $R(\rho)$, se obtiene inmediatamente de la ec. (3.42),

$$R(\rho) = \frac{2}{\Gamma(\beta + 3)} \rho^{\beta+1} \int_0^\infty dr r^{5+2\beta} e^{-r^2} = \rho^{\beta+1}, \quad (3.56)$$

lo que nos muestra el motivo de la elección de la constante en la ec. (3.55). La difusividad se calcula sustituyendo la ec. (3.56) en (3.44), con el resultado

$$D(\rho) = \frac{\beta + 3}{6} \rho^\beta. \quad (3.57)$$

Por supuesto, se obtiene el mismo resultado si se usa la ec. (3.36). Para $\beta = 0$, se tiene que $D(\rho) = 1/2$ y $R(\rho) = \rho$ [45]. De manera interesante, la dependencia algebraica de $f(\alpha)$ con la densidad de energía ρ aparece en sistemas reales. Por ejemplo, en los medios granulares [46] el campo de densidad ρ puede identificarse con la temperatura granular local. Además, para el modelo de esferas duras, la frecuencia de colisión media es proporcional a la raíz cuadrada de la temperatura granular. Así, el caso de el gas granular debería corresponder a $\beta = 1/2$, y de hecho se encuentra que $D(\rho) \propto \rho^{1/2}$ mientras que el término disipativo se comporta como $R(\rho) \propto \rho^{3/2}$. Este último es el responsable del decaimiento algebraico de la temperatura granular ($\propto t^{-2}$ para tiempos largos; ley de Haff) observado en el caso homogéneo cuando el sistema esta aislado [46]. En la bibliografía también se han investigado las llamadas moléculas de Maxwell, en las que la probabilidad de colisión es independiente de la velocidad [40], que se correspondería con el caso $\beta = 0$. Por otra parte, también es importante señalar que la analogía con el caso granular no es completa, ya que en nuestros modelos sólo tenemos el campo de densidad de energía, mientras que en los sistemas granulares también se tienen los campos de densidad de masa y de cantidad de movimiento, que son magnitudes conservadas.

Vamos a investigar ahora el comportamiento promedio para la familia de modelos definidos por nuestra elección de la tasa de colisión (3.55), cuyos coeficientes de transporte vienen dados por las ecuaciones (3.56) y (3.57). Primero, analizamos la evolución temporal de un sistema aislado, con condiciones periódicas de contorno. Debido a la disipación, y asumiendo que no hay estructura espacial, el sistema entra en un estado de enfriamiento homogéneo (HCS) caracterizado por una disipación continua de energía. La homogeneidad implica que $\rho(x, t) = \rho(t)$, y esta densidad de energía obedece $\partial_t \rho = -\nu \rho^{\beta+1}$ de acuerdo con las ecs. (3.47) and (3.56). La evolución temporal de la densidad de energía en el HCS es

$$\rho(t) = \begin{cases} \frac{\rho_0}{(1 + \nu \beta \rho_0^\beta t)^{1/\beta}} & \beta \neq 0 \\ \rho_0 e^{-\nu t} & \beta = 0 \end{cases} \quad (3.58)$$

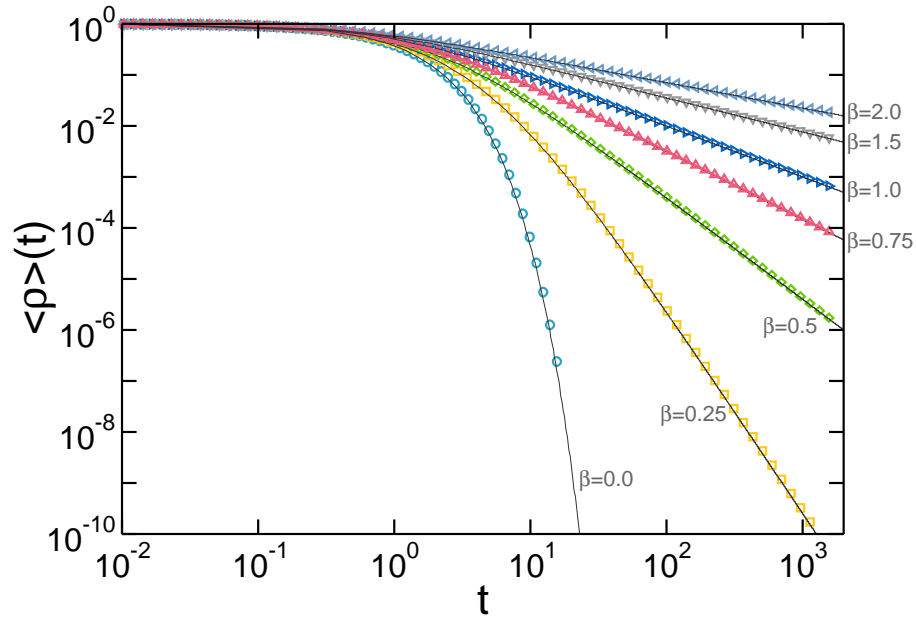


FIGURA 3.2: Decaimiento con el tiempo de la energía promedio por sitio para un sistema aislado en nuestra clase general de modelos disipativos. Hemos representado datos para $\nu = 1$, $L = 80$, y valores diferentes de $\beta \in [0, 2]$. Un comportamiento similar se observa para valores distintos de ν y L . La líneas se corresponden a las predicciones teóricas, véase la Eq. (3.58).

donde ρ_0 es la densidad de energía inicial en el sistema, que está fijada por las condiciones iniciales. Nótese el decaimiento exponencial de la energía en el tiempo para el caso lineal ($\beta = 0$), mientras que todos los casos no lineales ($\beta \neq 0$) obedecen un la ley potencial. Esto es de hecho una generalización de la ley de Haff para los gases granulares, que corresponderían a $\beta = 1/2$. La fig. 3.2 muestra la evolución temporal del promedio de la densidad de energía para diferentes valores de β y un valor concreto de ν y L , medidos en simulaciones de Monte Carlo. El acuerdo entre el resultado numérico y la ec. (3.58) es excelente en todos los casos, confirmando la conjetura de homogeneidad propuesta. No esperamos que el HCS se vuelva inestable en su evolución en el tiempo, puesto que nuestro modelo no contiene las velocidades, cuya correlación tras la colisión está detrás del origen de la inestabilidad del HCS en los gases granulares d -dimensionales [46].

A continuación estudiamos el comportamiento del sistema en el estado estacionario que se alcanza cuando éste interactúa con dos baños térmicos a temperatura T situados en sus extremos. Siguiendo el procedimiento introducido en la sección 3.2.1 de este capítulo, es conveniente definir una variable auxiliar

$$y = \rho^{\beta+1}, \quad \rho = y^{\frac{1}{\beta+1}}, \quad (3.59)$$

donde hemos usado las ecs. (3.50a) y (3.56). También calculamos la difusividad “efectiva” $\hat{D}(y)$ definida en la ec. (3.52); usando la ecuación (3.53) se obtiene que

$$\hat{D} = \frac{\beta + 3}{6(\beta + 1)}, \quad (3.60)$$

Así, mientras la difusividad “verdadera” $D(\rho)$ depende de ρ , como nos dice la ec.(3.56), la difusividad “efectiva” es constante, $\hat{D}(y) = \hat{D}$. Esto nos permite calcular explícitamente los perfiles promedio para la densidad y la corriente ya que la ec. (3.54), que los determina, es lineal en y . La solución estacionaria promedio para este caso, donde existe inyección de energía, es entonces

$$y_{\text{av}}(x) = T^{\beta+1} \frac{\cosh\left(x\sqrt{\frac{\nu}{\hat{D}}}\right)}{\cosh\sqrt{\frac{\nu}{4\hat{D}}}}, \quad (3.61a)$$

$$j_{\text{av}}(x) = -\hat{D}y'_{\text{av}}(x) = -T^{\beta+1}\sqrt{\nu\hat{D}} \frac{\sinh\left(x\sqrt{\frac{\nu}{\hat{D}}}\right)}{\cosh\sqrt{\frac{\nu}{4\hat{D}}}}. \quad (3.61b)$$

La densidad promedio se obtiene de manera inmediata a partir de (3.59) y (3.61),

$$\rho_{\text{av}}(x) = T \left[\frac{\cosh\left(x\sqrt{\frac{\nu}{\hat{D}}}\right)}{\cosh\sqrt{\frac{\nu}{4\hat{D}}}} \right]^{\frac{1}{\beta+1}}. \quad (3.62)$$

El campo de disipación promedio es básicamente $y_{\text{av}}(x)$, como expresa la ec. (3.50b)

$$d_{\text{av}}(x) = -\nu y_{\text{av}}(x). \quad (3.63)$$

La ecuación (3.62) muestra claramente una de las principales propiedades de los medios disipativos: los gradientes están controlados por la disipación y no por las condiciones de contorno. Aunque ambos extremos del sistema están en contacto con dos baños térmicos a la misma temperatura T , la densidad de energía ρ no es constante en el sistema, como se observa claramente en la figura 3.3. Un coeficiente macroscópico de disipación ν mayor produce un gradiente espacial mayor: la longitud característica de nuestro espacio adimensional x escala como $1/\nu$. En la figura, los puntos corresponden a la simulación Monte Carlo del modelo estocástico introducido en la sección 3.1, mientras que las líneas son las soluciones analíticas

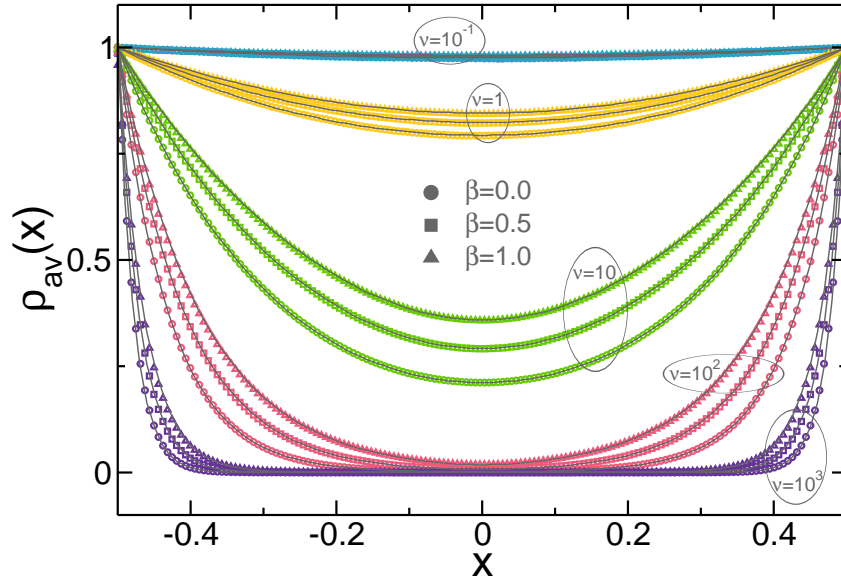


FIGURA 3.3: Perfiles de la densidad de energía promedio para diferentes valores de $\nu \in [10^{-1}, 10^3]$ y $\beta = 0, 0,5, 1$, en un sistema de tamaño $N = 160$. La temperatura de los baños es $T = 1$ siempre. Las líneas se corresponden a las predicciones teóricas, y el acuerdo entre teoría y simulación es excelente en todos los casos.

de la teoría hidrodinámica, ec. (3.62). El acuerdo entre teoría y simulación es excelente en todos los casos. En el límite casielástico $\nu \rightarrow 0^+$, la densidad es casi constante, ya que $\rho'(x) \propto \nu$ en ese límite. Para el caso $\nu = 10^{-1}$, en la figura se observa una estructura espacial muy débil sobre la escala mostrada, para todos los valores de β considerados. Es interesante señalar que se ven perfiles similares en sistemas de partículas con núcleo duro [47]. Cuando ν aumenta, el sistema se aleja del comportamiento “cuasihomogéneo”. De hecho, para los valores más grandes de $\nu = 10^3$, hay dos capas límite cerca de los extremos, caracterizado por unos gradientes internos grandes, mientras que $\rho \rightarrow 0^+$ en el interior del sistema.

Una cuestión importante es saber cómo converge el sistema hacia la descripción hidrodinámica cuando crece su longitud. Para estimarlo, representamos en la figura 3.4 la diferencia $\Delta\rho_L(x) \equiv \rho_{\text{exp}}^{(L)}(x) - \rho_{\text{av}}(x)$ entre los valores numéricos medidos para la densidad y los correspondientes valores teóricos, para diferentes tamaños del sistema en el rango $10 \leq L \leq 160$, como una función de la coordenada espacial x . Para ser concretos, mostramos los datos de $\nu = 10$ y $\beta = 0,5$, para los cuales los gradientes espaciales son importantes en el sistema, como vemos en la fig. 3.3. El perfil de exceso $\Delta\rho_L(x)$ exhibe una estructura no trivial pero, disminuye

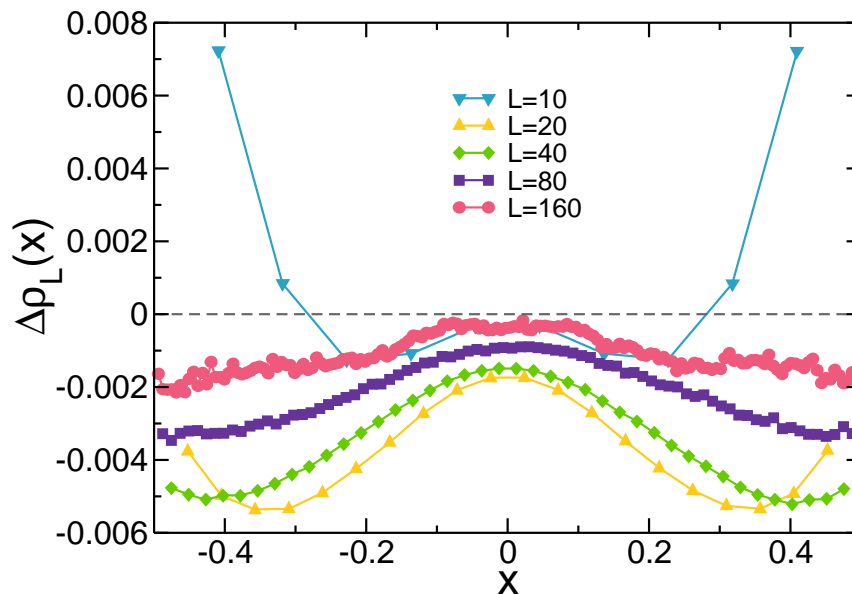


FIGURA 3.4: Perfiles de exceso de la densidad de energía promedio para $\nu = 10$, $\beta = 0,5$, y diferentes valores de $L \in [10, 160]$. Las correcciones de tamaño finito disminuyen rápidamente a cero con el tamaño del sistema.

rápidamente con el tamaño del sistema, siendo muy pequeño en todo él para $L = 160$. De hecho, incluso para el tamaño más pequeño $L = 10$, $\Delta\rho_L$ es bastante pequeño, ya que el error relativo está por debajo del uno por ciento en todo el sistema. Esto significa que la descripción hidrodinámica desarrollada aquí es válida a partir de tamaños del sistema “bastante pequeños”, aunque el límite concreto depende del coeficiente de disipación macroscópica ν . Cuando ν crece, se necesita considerar un sistema de tamaño mayor, puesto que los gradientes se hacen más importantes y se ve antes el carácter reticular del modelo microcópico subyacente.

Una característica relevante de los modelos disipativos con inyección de energía introducidos en esta sección es la existencia de una *resistencia de borde* en los extremos no trivial, que mide el salto entre la densidad de energía promedio en las posiciones de los extremos y la temperatura correspondiente a los baños térmicos: $\Delta T_L \equiv \rho_{\text{exp}}^{(L)}(x = \pm\frac{1}{2}) - T \neq 0$, véanse las figuras 3.3 y 3.4. Curiosamente, esta resistencia térmica en los bordes aparece sólo para $\beta \neq 0$, mostrando que la no linealidad es esencial para que se produzca este salto térmico. Este fenómeno es bien conocido en el transporte de energía no lineal, como resultado de la dispersión de energía que tiene lugar en la interfase sistema-baño. Como ejemplos, pueden

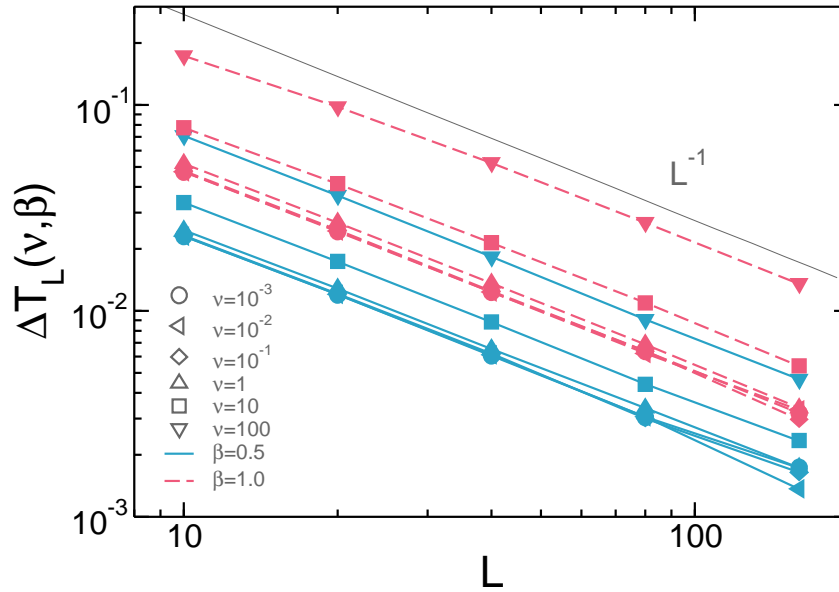


FIGURA 3.5: Resistencia térmica de borde como función del tamaño del sistema L , para distintos valores de $\nu \in [10^{-3}, 10^2]$ y $\beta = 0,5, 1$. En todos los casos el salto térmico en los contornos decae como L^{-1} , con una amplitud que crece con ν .

citarse sistemas como la cadena de osciladores de Fermi-Pasta-Ulam, fluidos de esferas duras, etc. [48]. La figura 3.5 representa el salto térmico medido en los extremos como función del tamaño del sistema para distintos valores de ν y $\beta > 0$, y muestra que ΔT_L decae como L^{-1} para sistemas suficientemente grandes. La amplitud aumenta con el parámetro de disipación ν y el exponente de no linealidad β .

En la fig. 3.6, mostramos el perfil de corriente promedio, medido en simulaciones tras cada evento de colisión, para diferentes valores del coeficiente de disipación macroscópico ν . Para ser concretos y para hacer la figura más simple y comprensible, hemos considerado $\beta = 0$. Otros valores de β tienen el mismo comportamiento cualitativo. La corriente no es constante a través del sistema, lo que es esencialmente distinto del comportamiento propio de los sistemas conservativos. Para un sistema fuertemente disipativo, $\nu \gg 1$, la corriente promedio es nula excepto en dos capas límite cercanas a los contornos, dentro de las cuales es muy grande. Lógicamente, esto es consecuencia de la forma de los perfiles de densidad y de la validez de la ley de Fourier en nuestro sistema. De nuevo, observamos que el acuerdo entre la expresión teórica para la corriente (línea continua) que se corresponde

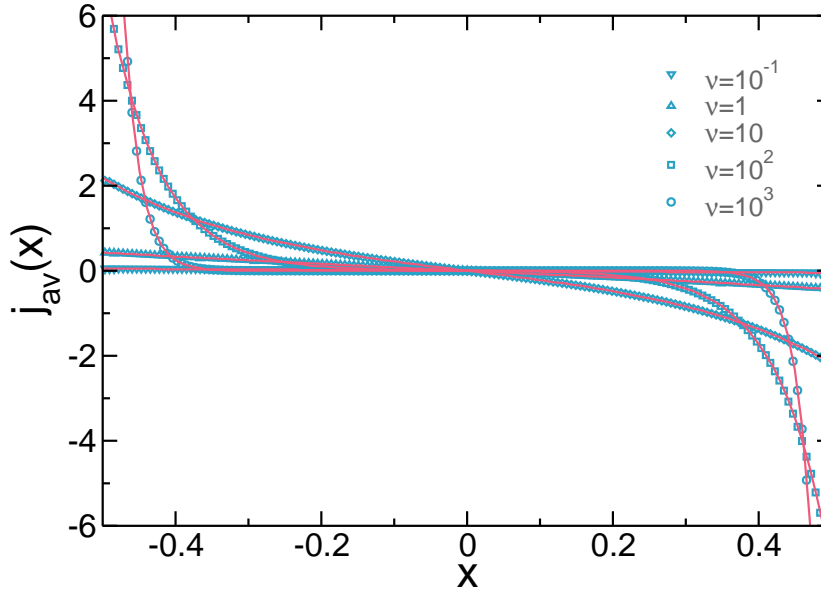


FIGURA 3.6: Perfiles de corriente promedio para diferentes valores de $\nu \in [10^{-1}, 10^3]$, $\beta = 0$ y $N = 160$. Nótese la estructura no trivial debido a la disipación en el seno del sistema, lo que contrasta con el comportamiento encontrado en los sistemas conservativos, donde el campo de corriente es homogéneo. Las líneas se corresponden con las predicciones teóricas, y el acuerdo teoría-simulación es excelente en todos los casos.

a la ec. (3.61b) y la simulación (puntos) es excelente en todos los casos.

La dependencia espacial del campo de disipación promedio $d_{av}(x)$ está representada en la fig. 3.7. Nótese que el eje vertical está en escala logarítmica, para poder mostrar con más claridad su comportamiento en el seno del sistema cuando $\nu \gg 1$. De nuevo, el acuerdo entre la teoría (línea continua) y la simulación (puntos) es excelente, incluso en el centro del sistema, donde $|d_{av}(x)|$ es realmente pequeño en el límite $\nu \gg 1$.

La simplicidad del modelo nos permite medir directamente los coeficientes de transporte en las simulaciones. En particular, una implicación importante de nuestra descripción hidrodinámica es que los coeficientes de transporte son función únicamente de la densidad de energía ρ , para sistemas de tamaño grande y bajo la hipótesis de equilibrio local, como expresan las ecs. (3.36) y (3.42). Hemos comprobado la validez de nuestra teoría comparando los valores numéricos de los coeficientes de transporte, medidos en simulaciones Monte Carlo, y las predicciones teóricas para la clase general de modelos considerados en esta sección, dadas por

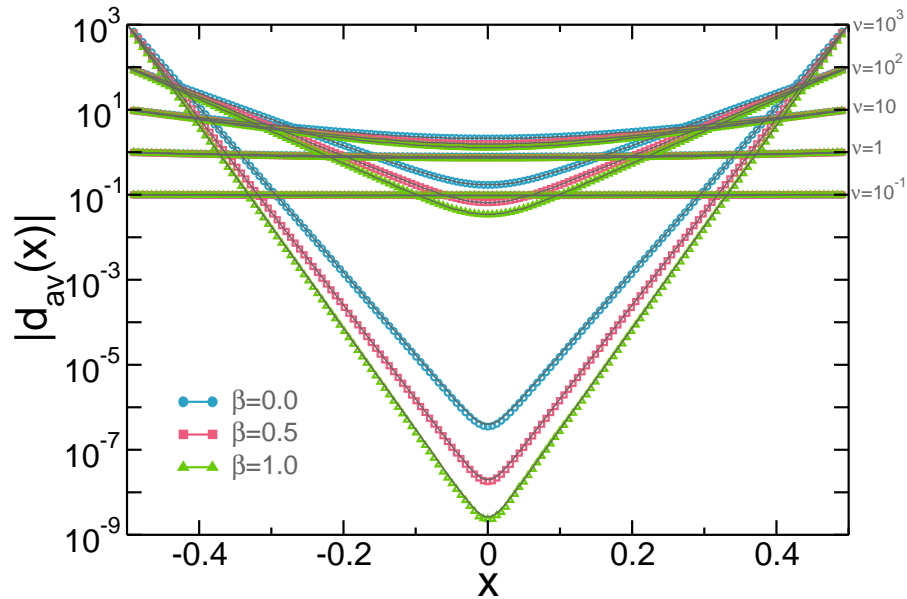


FIGURA 3.7: Perfiles del campo de disipación promedio para diferentes valores de $\nu \in [10^{-1}, 10^3]$ y $\beta = 0, 0.5, 1$, para $N = 160$. La temperatura del baño es $T = 1$ en todos los casos. Las líneas se corresponden con las predicciones teóricas, que reproducen de manera excelente los datos numéricos.

las ecs. (3.56) y (3.57). Vamos a empezar por considerar la evaluación numérica de $R(\rho)$, el coeficiente de transporte asociado a la disipación. En la fig. 3.8, hemos representado el campo de disipación promedio local $d_{av}(x)$ a lo largo de la cadena de sitios frente a la densidad de energía promedio local $\rho_{av}(x)$, es decir, hemos combinado los puntos de las figuras 3.3 y 3.7. En concreto, dibujamos $|d_{av}(x)|/\nu$ frente a $\rho_{av}(x) \forall x \in [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$. Aparte del tamaño del sistema $L = 160$ considerado en las figs. 3.3 y 3.7, hemos incluido puntos para tamaños más pequeños, desde $L = 10$ a $L = 80$, de modo que pueda verse la convergencia al comportamiento hidrodinámico. Para cada valor de β , todos los puntos colapsan en una misma curva, esto es, $R(\rho)$ es función únicamente de ρ . Además, la dependencia del nuevo coeficiente de transporte $R(\rho)$ concuerda con la expresión teórica (3.56). Es llamativa la rápida convergencia a la descripción hidrodinámica, ya que $L = 10$ es suficiente para recuperar la predicción teórica.

También hemos medido numéricamente la difusividad, que es el valor que relaciona la corriente local de energía con el gradiente de la densidad local de acuerdo con la ley de Fourier. Para ello, hemos combinado los datos usados en las figs. 3.3 y 3.6: representamos $-j_{av}/\rho'_{av}$, donde la prima indica la derivada espacial numérica

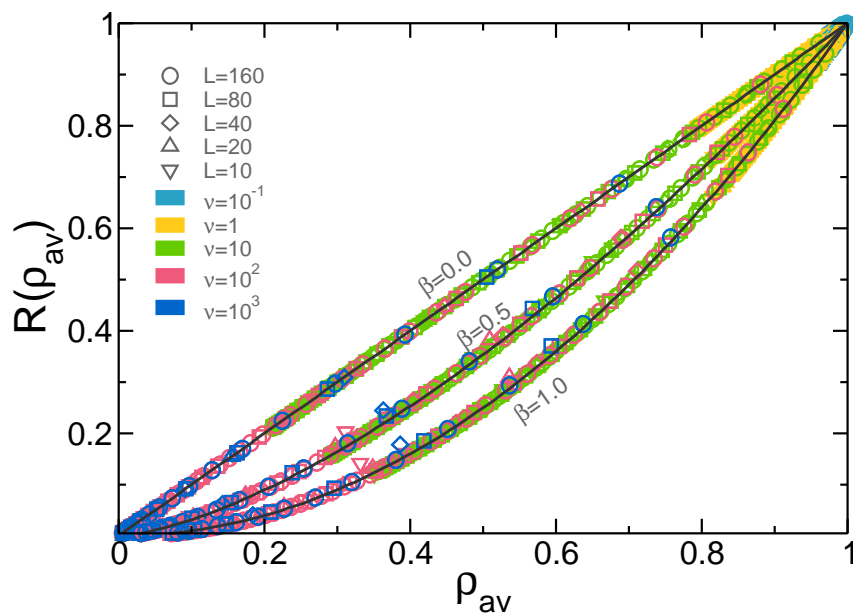


FIGURA 3.8: Coeficiente de transporte de la disipación $R(\rho)$ medido en las simulaciones, como función de la densidad de energía promedio local, para diferentes valores de ν , β y L . Para cada valor de β considerado, los datos numéricos colapsan con la predicción teórica $\rho^{\beta+1} \forall \nu, L$.

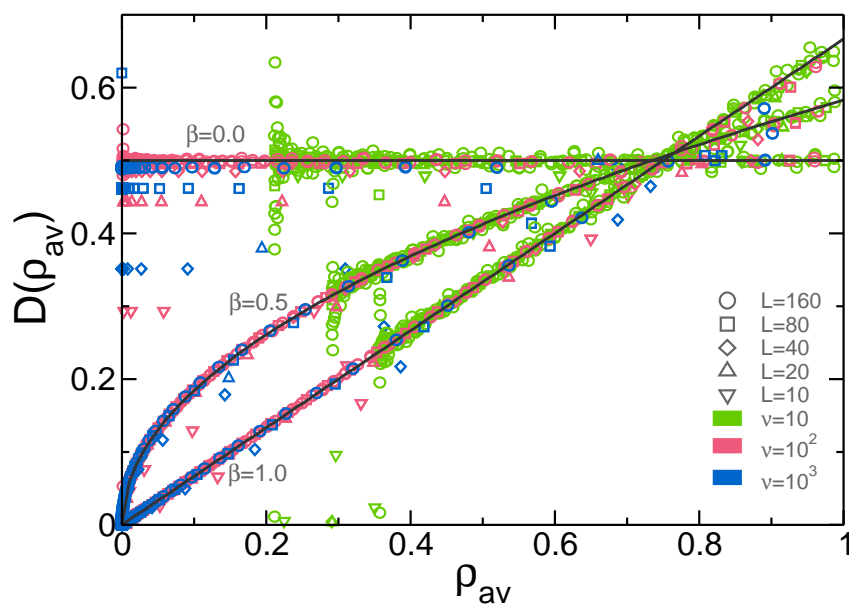


FIGURA 3.9: Comparación entre los valores teóricos y numéricos de la difusividad $D(\rho)$ para $\beta = 0, 0,5, 1$. Hemos considerado distintos valores de ν y L . El acuerdo entre teoría y simulación es excelente.

del perfil de energía medido, frente a ρ_{av} . Igual que sucedía para el coeficiente de transporte para la disipación $R(\rho)$, el acuerdo entre teoría y simulación para $D(\rho)$ es muy bueno. Hay algunos puntos que se alejan de la predicción teórica, pero esta discrepancia es debida a lo pequeño de los valores de $j_{av}(x)$ y $\rho'_{av}(x)$ cerca del centro del sistema, donde ρ_{av} alcanza un mínimo y por tanto ρ'_{av} tiende a cero. Esto conlleva errores numéricos importantes en el cociente $-j_{av}/\rho'_{av}$ cerca del mínimo correspondiente a cada perfil promedio $\rho_{av}(x)$.

Capítulo 4

Hidrodinámica fluctuante

Hemos visto en el capítulo anterior que la energía local $\rho_{l,p}$ obedece la ecuación de balance (3.10), con un término difusivo, dado por la derivada espacial discreta de la corriente microscópica, y un término disipativo. Promediando sobre todas las posibles realizaciones de la dinámica, se ha obtenido la ecuación hidrodinámica (3.47), cuya estructura es similar, pero ahora en términos de los campos hidrodinámicos continuos (densidad, corriente y disipación). El principal objetivo de este capítulo es analizar el problema más allá del comportamiento promedio, esto es, estudiar las fluctuaciones locales de los campos de corriente y disipación o, dicho de manera equivalente, las propiedades de sus respectivos “ruidos”.

Afrontamos el problema de caracterizar los términos de ruido en el límite de tamaño grande $L \gg 1$, el mismo límite en el cual hemos demostrado que la ecuación (3.47) es válida sobre la escala hidrodinámica definida en la ec. (3.46). La idea es separar la corriente microscópica $j_{l,p}$ en un término principal $\tilde{j}_{l,p}$ y un término de ruido $\xi_{l,p}$, $j_{l,p} = \tilde{j}_{l,p} + \xi_{l,p}$. De manera equivalente, tendremos para el campo de disipación microscópico que $d_{l,p} = \tilde{d}_{l,p} + \eta_{l,p}$, con el término principal $\tilde{d}_{l,p}$ y el ruido de la disipación $\eta_{l,p}$. La idea física de los términos *principales* es que corresponden al promedio “condicionado” de la magnitud correspondiente para una configuración dada ρ y, en consecuencia, el valor medio de cada campo coincide con el de su término principal correspondiente, $\langle \tilde{j}_{l,p} \rangle = \langle j_{l,p} \rangle$, $\langle \tilde{d}_{l,p} \rangle = \langle d_{l,p} \rangle$. Entonces, ambos ruidos tienen valor medio nulo, $\langle \xi_{l,p} \rangle = 0$, $\langle \eta_{l,p} \rangle = 0$. En este capítulo encontramos que: (i) el ruido de la corriente es blanco y gaussiano, (ii) el ruido correspondiente a la disipación es subdominante respecto al ruido de la corriente si $1 - \alpha = \mathcal{O}(L^{-2})$, como viene dado por la ec. (3.18). Por lo tanto, el ruido de la corriente es la principal fuente de fluctuaciones a nivel mesoscópico. Por otra parte, las fluctuaciones del campo de disipación están ‘ligadas’ a las del campo de

densidad, ya que $d_{l,p} = \nu R(\rho_{l,p})$ al poder despreciarse el ruido propio del campo de disipación.

4.1. Definición de los ruidos

4.1.1. La corriente fluctuante. Valores promedio y propiedades del ruido.

Vamos a considerar las fluctuaciones de la corriente microscópica $j_{l,p}$. Como hemos descrito arriba, la idea es dividir la corriente en un término principal y otro de ruido

$$j_{l,p} = \tilde{j}_{l,p} + \xi_{l,p} \quad (4.1)$$

tal que $\langle \tilde{j}_{l,p} \rangle = \langle j_{l,p} \rangle$. La elección siguiente,

$$\tilde{j}_{l,p} = \frac{\alpha}{2L} \frac{(\rho_{l,p} - \rho_{l+1,p}) f(\Sigma_{l,p})}{\Omega_p(L)}, \quad (4.2)$$

garantiza la condición anterior para la igualdad de promedios, veáse la ec. (3.12). Para aclarar la diferencia entre $j_{l,p}$ y $\tilde{j}_{l,p}$, nótese que mientras el primero es exactamente cero a no ser que colisione el par $(l, l+1)$ en el instante p , como se sigue de la ec. (3.8), el segundo puede tomar un valor no trivial incluso en ausencia de dicha colisión; sin embargo sus promedios coinciden. Puede entenderse $\tilde{j}_{l,p}$ como el promedio de $j_{l,p}$ condicionado a un cierto perfil de densidad dado $\boldsymbol{\rho}_p = \{\rho_{1,p}, \dots, \rho_{N,p}\}$, $\tilde{j}_{l,p} = \langle j_{l,p} \rangle_{\boldsymbol{\rho}}$. Esto quiere decir que promediamos sobre los números aleatorios z_p e y_p en la ec. (3.8) pero no sobre $\boldsymbol{\rho}$. La ec. (4.2) es la ley de Fourier a nivel microscópico, $\tilde{j}_{l,p}$ es proporcional al gradiente de la densidad local de energía. Queremos estudiar las propiedades del ruido $\xi_{l,p} = j_{l,p} - \tilde{j}_{l,p}$. Comenzamos por su promedio y su función de correlación $\langle \xi_{l,p} \xi_{l',p'} \rangle$. De la igualdad $\langle \tilde{j}_{l,p} \rangle = \langle j_{l,p} \rangle$, tenemos inmediatamente que

$$\langle \xi_{l,p} \rangle = 0. \quad (4.3)$$

Para la función de correlación del ruido, es fácil mostrar que

$$\langle \xi_{l,p} \xi_{l',p'} \rangle = \langle j_{l,p} j_{l',p'} \rangle - \langle \tilde{j}_{l,p} \tilde{j}_{l',p'} \rangle. \quad (4.4)$$

Además, a partir de la definición de corriente, ec. (3.8), es fácil probar también que $\langle \xi_{l,p} \xi_{l',p'} \rangle = 0$ para $p \neq p'$, así que no hay correlación en el ruido de la corriente

para distintos instantes de tiempo. Para tiempos iguales, $p = p'$, el segundo término del segundo miembro de la ec. (4.4) es despreciable comparado con el primero en el límite $L \gg 1$, puesto que es de orden $\mathcal{O}(L^{-2})$, mientras que, como veremos a continuación, el primer término se comporta como $\mathcal{O}(L^{-1})$ y es el dominante. Usando la definición de corriente microscópica (3.8), tenemos que

$$j_{l,p} j_{l',p} = \alpha^2 [(1 - z_p) \rho_{l,p} - z_p \rho_{l+1,p}] [(1 - z_p) \rho_{l',p} - z_p \rho_{l'+1,p}] \delta_{y_p, l} \delta_{y_p, l'}. \quad (4.5)$$

Ahora tenemos en cuenta que $\langle z_p \rangle = 1/2$, $\langle z_p^2 \rangle = 1/3$, y que

$$\langle \delta_{y_p, l} \delta_{y_p, l'} \rangle_\rho = \frac{f(\Sigma_{l,p})}{L \Omega_p(L)} \delta_{l, l'}, \quad (4.6)$$

llegando a

$$\langle j_{l,p} j_{l',p} \rangle \sim \frac{\alpha^2}{3L} \left\langle \frac{(\rho_{l+1,p}^2 + \rho_{l,p}^2 - \rho_{l,p} \rho_{l+1,p}) f(\Sigma_{l,p})}{\Omega_p(L)} \right\rangle \delta_{l, l'}, \quad (4.7)$$

que es efectivamente de orden $\mathcal{O}(L^{-1})$. Por tanto, el término dominante de la correlación del ruido de la corriente en el límite $L \gg 1$ es

$$\langle \xi_{l,p} \xi_{l',p'} \rangle \sim \frac{1}{L} \Xi_{l,p} \delta_{l, l'} \delta_{p, p'}, \quad (4.8)$$

donde hemos despreciado los términos $\mathcal{O}(L^{-2})$, y definido

$$\Xi_{l,p} = \frac{\alpha^2}{3} \left\langle \frac{(\rho_{l+1,p}^2 + \rho_{l,p}^2 - \rho_{l,p} \rho_{l+1,p}) f(\Sigma_{l,p})}{\Omega_p(L)} \right\rangle. \quad (4.9)$$

En principio, la ec. (4.9) no puede expresarse en términos de $\langle \rho_{l,p} \rangle$, de modo que, como cabía esperar, la ecuación de balance fluctuante (3.10) no está cerrada a nivel microscópico. Usando de nuevo la aproximación de “equilibrio local” [21] de la sección 3.2.1, obtenemos

$$\Xi_{l,p} \sim \tau_p \frac{\alpha^2 \rho_{av}^2}{3} \int_0^\infty dr r^7 f(\rho_{av} r^2) e^{-r^2}. \quad (4.10)$$

En el límite continuo tenemos que tener en cuenta la ec. (3.16a), e introducir en consecuencia el mismo escalamiento para la corriente fluctuante y su ruido, esto es

$$j_{l,p} \rightarrow L^{-2} \tau_p j(x, t), \quad \xi_{l,p} \rightarrow L^{-2} \tau_p \xi(x, t). \quad (4.11)$$

De este modo,

$$j(x, t) = \tilde{j}(x, t) + \xi(x, t). \quad (4.12)$$

Con esta definición, se obtiene inmediatamente que

$$\langle \tilde{j}(x, t) \rangle = j_{\text{av}}(x, t), \quad (4.13a)$$

$$\langle \xi(x, t) \rangle = 0. \quad (4.13b)$$

Además la función de correlación del ruido de la corriente es, combinando las ecs. (4.8)-(4.11),

$$\langle \xi(x, t) \xi(x', t') \rangle \sim \frac{1}{L} \sigma(\rho_{\text{av}}) \delta(x - x') \delta(t - t'), \quad (4.14)$$

donde hemos tenido en cuenta la cuasi elasticidad de la dinámica microscópica, $1 - \alpha = \mathcal{O}(L^{-2})$, véase la ec. (3.18). Asimismo, hemos introducido la "movilidad"

$$\sigma(\rho) = \frac{\rho^2}{3} \int_0^\infty dr r^7 f(\rho r^2) e^{-r^2} = 2\rho^2 D(\rho) \quad (4.15)$$

y utilizado que

$$\frac{\delta_{l,l'}}{\Delta x} \sim \delta(x - x'), \quad \frac{\delta_{p,p'}}{\Delta t_p} \sim \delta(t - t'), \quad (4.16)$$

donde Δx y Δt_p están definidas en las ecs. (3.14) y (3.46), respectivamente. Por tanto, hemos demostrado que el ruido de la corriente es blanco: su valor promedio es cero y está delta-correlacionado en el espacio y en el tiempo. A continuación, probaremos que también es gaussiano.

La ecuación (4.15), $\sigma(\rho) = 2\rho^2 D(\rho)$, es una relación de fluctuación-disipación para el caso disipativo. Relaciona la movilidad y la difusividad, y es análoga a la existente en los sistemas conservativos [10, 21]. La validez de esta relación de fluctuación-disipación entronca con la cuasielasticidad de la dinámica microscópica (estocástica). Para un valor dado del coeficiente de disipación mesoscópico ν , el valor correspondiente de la inelasticidad microscópica es $\alpha = 1 - \frac{\nu}{2L^2}$, véase la ec. (3.18), así que valores de ν del orden de la unidad corresponden a una dinámica microscópica cuasielástica para $L \gg 1$. Se ha encontrado una relación fluctuación-disipación similar en algunos sistemas disipativos, que incluyen los medios granulares, para inelasticidades no muy grandes[49]. Por otra parte, para un coeficiente de disipación macroscópico suficientemente grande, para el que $1 - \alpha = \mathcal{O}(1)$ y $\nu \sim \mathcal{O}(L^2)$, la aproximación de equilibrio local fallaría y esperaríamos una ruptura de la relación de fluctuación-disipación, y posiblemente de la hidrodinámica, como también sucede en otros sistemas disipativos [49, 50].

4.1.2. Carácter gaussiano del ruido de la corriente

En el límite de tamaño del sistema grande $L \gg 1$, el ruido de la corriente introducido en la sección 4.1.3 es blanco, como expresan las ecuaciones (4.13b) y (4.14), con la movilidad $\sigma(x, t)$ dada por la ec. (4.15), independiente de L . Podemos introducir un nuevo campo $\tilde{\xi}(x, t)$ dado por

$$\xi(x, t) = L^{-1/2} \tilde{\xi}(x, t), \quad (4.17)$$

tal que $\tilde{\xi}(x, t)$ permanece finito en el límite de tamaño del sistema $L \rightarrow \infty$,

$$\langle \tilde{\xi}(x, t) \rangle = 0, \quad \langle \tilde{\xi}(x, t) \tilde{\xi}(x', t') \rangle = \sigma(\rho) \delta(x - x') \delta(t - t'). \quad (4.18)$$

En esta sección, mostramos que todos los cumulantes de $\tilde{\xi}(x, t)$ de orden superior al segundo se anulan en el límite de sistemas muy grandes.

Vamos a considerar un cumulante de orden n del ruido microscópico $\xi_{l,p}$, que es igual al momento de orden n -ésimo de ξ más una suma de productos no lineales de momentos de orden más bajo de ξ . Un cálculo análogo al llevado a cabo para la correlación $\langle \xi_{l,p} \xi_{l',p'} \rangle$ muestra que el comportamiento dominante de cualquier momento es del orden de L^{-1} , obtenido cuando todos los tiempos son iguales. Por lo tanto, el momento de orden n $\langle j_{l,p} j_{l',p'} \cdots j_{l^{(n)}, p^{(n)}} \rangle$ da el comportamiento dominante, de orden L^{-1} , para $p = p' = \cdots = p^{(n)}$; cualquier otra contribución al cumulante es, al menos, de orden L^{-2} . De esta forma,

$$\langle j_{l,p} j_{l',p'} \cdots j_{l^{(n)}, p^{(n)}} \rangle \sim L^{-1} \tau_p \langle C_{lp} \rangle \delta_{l,l'} \delta_{l',l''} \cdots \delta_{l^{(n-1)}, l^{(n)}} \delta_{p,p'} \delta_{p',p''} \cdots \delta_{p^{(n-1)}, p^{(n)}}, \quad (4.19)$$

donde $\langle C_{lp} \rangle$ representa un promedio que permanece finito en el límite $L \rightarrow \infty$. En el límite continuo, cada corriente introduce un factor L^2/τ_p debido al escalamiento introducido en la ec. (3.16a), y

$$\begin{aligned} \langle \xi(x, t) \xi(x', t') \cdots \xi(x^{(n)}, t^{(n)}) \rangle &\sim L^{2n-1} \tau_p^{1-n} \langle C(x, t) \rangle \frac{\delta(x - x') \cdots \delta(x^{(n-1)} - x^{(n)})}{L^{n-1}} \\ &\times \frac{\tau_p^{n-1} \delta(t - t') \cdots \delta(t^{(n-1)} - t^{(n)})}{L^{3(n-1)}}, \end{aligned} \quad (4.20)$$

esto es,

$$\begin{aligned} \langle \xi(x, t) \xi(x', t') \cdots \xi(x^{(n)}, t^{(n)}) \rangle &= L^{3-2n} \langle C(x, t) \rangle \delta(x - x') \delta(x' - x'') \cdots \delta(x^{(n-1)} - x^{(n)}) \\ &\times \delta(t - t') \delta(t' - t'') \cdots \delta(t^{(n-1)} - t^{(n)}). \end{aligned} \quad (4.21)$$

En estas ecuaciones, $\langle C(x, t) \rangle$ es el comportamiento finito dominante de $\langle C_{l,p} \rangle$ en el límite de tamaño del sistema grande $L \gg 1$, bajo la aproximación de equilibrio local introducida en 3.2.1. También hemos tenido en cuenta la relación entre la delta de Kronecker y la delta de Dirac, ec. (4.16). Utilizando el ruido reescalado del orden de la unidad $\tilde{\xi}$,

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\xi}(x, t) \tilde{\xi}(x', t') \cdots \tilde{\xi}(x^{(n)}, t^{(n)}) \rangle &\sim L^{3(1-\frac{n}{2})} \langle C(x, t) \rangle \delta(x - x') \delta(x' - x'') \cdots \delta(x^{(n-1)} - x^{(n)}) \\ &\times \delta(t - t') \delta(t' - t'') \cdots \delta(t^{(n-1)} - t^{(n)}). \end{aligned} \quad (4.22)$$

Por lo tanto, en el límite de $L \rightarrow \infty$,

$$\langle \tilde{\xi}(x, t) \tilde{\xi}(x', t') \cdots \tilde{\xi}(x^{(n)}, t^{(n)}) \rangle = 0 \quad \text{para todo } n > 2, \quad (4.23)$$

lo que completa la prueba.

El carácter gaussiano de las fluctuaciones del campo de corriente nos permitirá, como veremos en el siguiente capítulo, extender la teoría de las fluctuaciones macroscópica recientemente introducida en la ref. [21] al caso de sistemas disipativos no lineales [45]. Este esquema teórico hace factible el estudio de las fluctuaciones, tanto típicas como raras, de observables macroscópicos en situaciones arbitrariamente lejos del equilibrio. Esto posibilita predecir las funciones de grandes desviaciones que caracterizan la estadística, así como los perfiles óptimos de los campos hidrodinámicos que sostienen dichas fluctuaciones. La validez de la descripción hidrodinámica fluctuante deducida aquí y, en particular, de la aproximación de “equilibrio local”, puede ser probada *a posteriori*. Para ello, comparamos las predicciones para la función de grandes desviaciones de la Teoría Macroscópica de Fluctuaciones asociada a nuestra descripción hidrodinámica con resultados numéricos.

4.1.3. La disipación fluctuante. Valores promedio y propiedades del ruido.

Nuestro punto de partida es la ec. (3.9) para la disipación macroscópica $d_{l,p}$, que dividimos en dos términos: uno principal $\tilde{d}_{l,p}$ más un ruido $\eta_{l,p}$, es decir,

$$d_{l,p} = \tilde{d}_{l,p} + \eta_{l,p}, \quad (4.24a)$$

$$\tilde{d}_{l,p} = -\frac{1 - \alpha}{L} \frac{\rho_{l,p} [f(\Sigma_{l,p}) + f(\Sigma_{l-1,p})]}{\Omega_p(L)}. \quad (4.24b)$$

Claramente, el promedio del término principal verifica $\langle \tilde{d}_{l,p} \rangle = \langle d_{l,p} \rangle$, véase la ec. (3.13), y así el promedio del ruido se anula, $\langle \eta_{l,p} \rangle = 0$. De nuevo, como en el caso de la corriente, $\tilde{d}_{l,p}$ puede considerarse como el promedio de $d_{l,p}$ restringido a una configuración dada de la densidad de energía ρ , $\tilde{d}_{l,p} = \langle d_{l,p} \rangle_{\rho}$. De las ecuaciones (3.9) y (4.24), tenemos que

$$\eta_{l,p} = -(1 - \alpha)\rho_{l,p} \left[\delta_{y_p,l} + \delta_{y_p,l-1} - \frac{f(\Sigma_{l,p}) + f(\Sigma_{l-1,p})}{L\Omega_p(L)} \right], \quad (4.25)$$

y entonces

$$\begin{aligned} \eta_{l,p}\eta_{l',p'} &= (1 - \alpha)^2 \rho_{l,p}\rho_{l',p'} \left[\delta_{y_p,l} + \delta_{y_p,l-1} - \frac{f(\Sigma_{l,p}) + f(\Sigma_{l-1,p})}{L\Omega_p(L)} \right] \\ &\quad \times \left[\delta_{y_{p'},l'} + \delta_{y_{p'},l'-1} - \frac{f(\Sigma_{l',p'}) + f(\Sigma_{l'-1,p'})}{L\Omega_{p'}(L)} \right]. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Ahora, tomando promedios es claro que $\langle \eta_{l,p}\eta_{l',p'} \rangle = 0$ si $p \neq p'$, porque las variables $y_p, y_{p'}$ son independientes en ese caso y los términos entre corchetes tienen promedio cero. Por consiguiente, nos restringiremos al caso $p = p'$. Realizando un cálculo similar al hecho para la corriente, obtenemos que

$$\langle \eta_{l,p}\eta_{l',p} \rangle \sim \frac{(1 - \alpha)^2}{L} \left\langle \frac{\rho_{l,p}\rho_{l',p}}{\Omega_p(L)} [f(\Sigma_{l,p})(\delta_{l,l'} + \delta_{l,l'-1}) + f(\Sigma_{l-1,p})(\delta_{l,l'} + \delta_{l,l'+1})] \right\rangle, \quad (4.27)$$

después de usar la ec. (4.6) y despreciar los términos $\mathcal{O}(L^{-2})$. El término dominante de la correlación del ruido podemos escribirlo entonces como

$$\langle \eta_{l,p}\eta_{l',p} \rangle \sim \frac{1}{L} (\bar{\kappa}_{l,p}^{(1)} \delta_{l,l'} + \bar{\kappa}_{l,p}^{(2)} \delta_{l,l'-1} + \bar{\kappa}_{l,p}^{(3)} \delta_{l,l'+1}) \delta_{p,p'}, \quad (4.28)$$

donde hemos definido

$$\bar{\kappa}_{l,p}^{(1)} = 2(1 - \alpha)^2 \left\langle \rho_{l,p}^2 \frac{f(\Sigma_{l,p})}{\Omega_p(L)} \right\rangle, \quad (4.29a)$$

$$\bar{\kappa}_{l,p}^{(2)} = (1 - \alpha)^2 \left\langle \rho_{l,p} \rho_{l+1,p} \frac{f(\Sigma_{l,p})}{\Omega_p(L)} \right\rangle, \quad (4.29b)$$

$$\bar{\kappa}_{l,p}^{(3)} = (1 - \alpha)^2 \left\langle \rho_{l-1,p} \rho_{l,p} \frac{f(\Sigma_{l-1,p})}{\Omega_p(L)} \right\rangle. \quad (4.29c)$$

Podemos dar una expresión para el promedio en (4.27) que sea función exclusivamente del campo de densidad de energía local $\rho(x, t)$, si introducimos la aproximación de equilibrio local, al igual que hicimos para la corriente. Como el cálculo es completamente análogo, no presentamos los detalles aquí, limitándonos a dar

los principales resultados. En particular, la estructura de la ec. (4.27) y la relación $1 - \alpha = \frac{\nu}{2L^2}$ implican que

$$\langle \eta_{l,p} \eta_{l',p'} \rangle \sim L^{-5} \nu^2 \tau_p \left(\kappa_{l,p}^{(1)} \delta_{l,l'} + \kappa_{l,p}^{(2)} \delta_{l,l'-1} + \kappa_{l,p}^{(3)} \delta_{l,l'+1} \right) \delta_{p,p'}, \quad (4.30)$$

donde $\kappa_{l,p}^{(i)}$, $i = 1, 2, 3$, son promedios en la aproximación de “equilibrio local”, que surgen al introducir la misma en las $\bar{\kappa}^{(i)}$, y que se mantienen del orden de la unidad en el límite $L \rightarrow \infty$. Se obtiene

$$\kappa_{l,p}^{(1)} \sim \frac{1}{3} \rho_{av}^2 \int_0^\infty dr r^7 f(r^2 \rho_{av}) e^{-r^2}, \quad (4.31a)$$

$$\kappa_{l,p}^{(2)} = \kappa_{l,p}^{(3)} = \frac{1}{4} \kappa_{l,p}^{(1)}, \quad (4.31b)$$

La igualdad de $\kappa_{l,p}^{(2)}$ y $\kappa_{l,p}^{(3)}$ es consecuencia de que la diferencia entre $\bar{\kappa}^{(2)}_{l,p}$ y $\bar{\kappa}^{(3)}_{l,p}$ es de orden L^{-1} , ya que se corresponden a dos promedios completamente análogos, pero desplazados un sitio de la red. Con la definición $\eta(x, t) = L^3 \eta_{l,p} / \tau_p$, véase la ec. (3.18), introducimos el límite continuo del ruido de la disipación, y su función de correlación es

$$\langle \eta(x, t) \eta(x', t') \rangle \sim L^{-3} \nu^2 \kappa(\rho) \delta(x - x') \delta(t - t'), \quad (4.32)$$

donde hemos usado de nuevo la ec. (4.16), y definido $\kappa(\rho)$ como el límite continuo de $\sum_{i=1}^3 \kappa_{l,p}^{(i)}$. Podemos ver que el límite continuo del término diagonal $\kappa_{l,p}^{(1)}$ ec. (4.31a) es exactamente igual a $\sigma(\rho)$, mientras que cada término no diagonal $\kappa_{l,p}^{(2,3)}$, dado por la ec. (4.31b), contribuye $\frac{1}{4} \sigma(\rho)$. Por tanto,

$$\kappa(\rho) = \frac{3}{2} \sigma(\rho). \quad (4.33)$$

La ecuación (4.32) nos dice que el ruido de la disipación ($\propto L^{-3/2}$) es mucho más débil que el ruido de la corriente ($\propto L^{-1/2}$) en el límite de tamaño del sistema grande $L \gg 1$. Por tanto, lo despreciaremos en lo que sigue, es decir, el campo de disipación es

$$d(x, t) = -\nu R(\rho), \quad (4.34)$$

sin ruido “propio”. La cuasielasticidad de la dinámica microscópica, $1 - \alpha = \frac{\nu}{2L^2}$, es la responsable del carácter subdominante del ruido de la disipación frente al ruido de la corriente en el límite de tamaño de sistema grande. Para estudiar los momentos de orden superior del ruido, seguimos el mismo procedimiento que en la subsección 4.1.1. Teniendo en cuenta que el término dominante del ruido es de

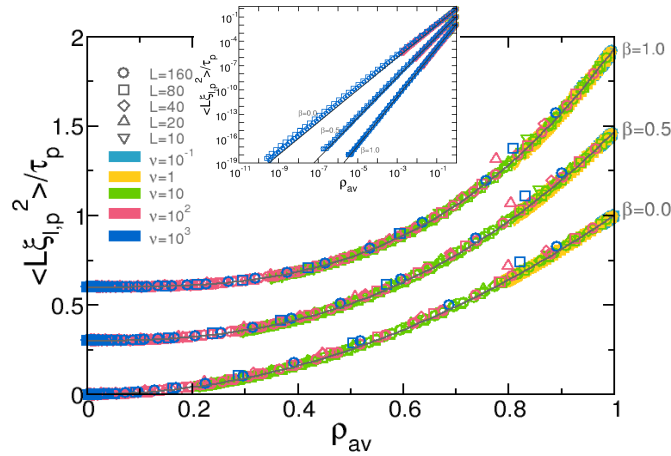


FIGURA 4.1: Comparación entre las medidas numéricas de la movilidad $\sigma(\rho)$, obtenidas a partir de la igualdad (4.36), y la predicción teórica, dada por las ecs. (4.15) y (3.57), para $\beta = 0, 0.5, 1$. El acuerdo es excelente en todos los casos, incluso para tamaños del sistema relativamente pequeños ($L = 10$). Las curvas para $\beta = 0, 5$ ($\beta = 1$) se han desplazado verticalmente 0,3 (0,6) unidades. El recuadro muestra la misma figura en escala logarítmica.

orden $L^{-1/2}$, definimos el ruido escalado $\tilde{\eta}(x, t) = \eta(x, t)L^{1/2}$. Puede demostrarse que (para más detalles véase el apéndice A)

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\eta}(x, t) \tilde{\eta}(x', t') \cdots \tilde{\eta}(x^{(n)}, t^{(n)}) \rangle &\sim L^{3-5n/2} \nu^n \langle D(x, t) \delta(x - x') \cdots \delta(x^{(n-1)} - x^{(n)}) \\ &\quad \times \delta(t - t') \delta(t' - t'') \cdots \delta(t^{(n-1)} - t^{(n)}) \rangle. \end{aligned} \quad (4.35)$$

donde $\langle D(x, t) \rangle$ es un promedio que permanece finito en el límite $L \rightarrow \infty$. Igual que sucedía para ruido de la corriente, el ruido del campo de disipación es gaussiano, pero esto es mayormente irrelevante para nuestro estudio. Lo importante es que las fluctuaciones dominantes a nivel hidrodinámico son las de la corriente: todos los momentos del ruido escalado $\tilde{\eta}$ se anulan para $L \rightarrow \infty$, luego para un sistema grande puede despreciarse el ruido de la disipación. La ecuación (4.34) nos dice que, las fluctuaciones de la disipación $d(x, t)$ están “ligadas” a las de el campo de energía $\rho(x, t)$, como consecuencia de la “cuasi-elasticidad” de la dinámica a nivel microscópico. Este caracter cuasielástico de la dinámica microscópica es compatible con la existencia de una disipación finita a nivel mesoscópico, como expresa el valor finito del coeficiente macroscópico de disipación ν .

4.2. Resultados. Comparación teoría simulación.

Para finalizar este capítulo, mostramos las comparaciones de las predicciones teóricas de las amplitudes del ruido con los resultados numéricos, obtenidos mediante simulaciones de Monte Carlo de la dinámica microscópica. La figura 4.1 muestra la amplitud de las fluctuaciones de la corriente, esto es, la movilidad σ . De la combinación de las ecuaciones (4.8), (4.9) y (4.15), resulta que

$$\frac{L\langle\xi_{l,p}^2\rangle}{\tau_p} = \sigma(\rho_{av}). \quad (4.36)$$

Por lo tanto, hemos representado el primer miembro de esta ecuación como función de la densidad promedio a lo largo de la cadena, ambas medidas numéricamente en las simulaciones. Esto se ha hecho para los mismos valores de $\beta = 0, 0,5, 1$ que venimos usando a lo largo de esta memoria, y para varios valores del coeficiente de disipación macroscópico ν y del tamaño del sistema L . En el recuadro de la figura 4.1, se muestra el mismo gráfico en escala logarítmica. Se observan líneas rectas con pendiente $\beta + 2$, de acuerdo con el comportamiento algebraico de $\sigma \propto \rho^{\beta+2}$ predicho por la teoría hidrodinámica, ecs. (4.15) y (3.57). El excelente acuerdo entre teoría y simulación y, en concreto, el colapso de los datos correspondientes a diferentes valores de L son una prueba clara de que el escalamiento predicho del ruido de la corriente con el tamaño del sistema, $\langle\xi(x,t)\xi(x',t')\rangle \propto L^{-1}$, ec. (4.14), es el correcto.

De manera análoga, la fig. 4.2 muestra la medida de las fluctuaciones *diagonales*, dadas por el término $\kappa_{l,p}^1$ del ruido de la disipación, como función de la densidad local promedio. A partir de las ecs. (4.30)-(4.32) y la discusión que les sigue, estas fluctuaciones diagonales están definidas como

$$\frac{L^5\langle\eta_{l,p}^2\rangle}{\nu^2\tau_p} \equiv \kappa_{\text{diag}}(\rho_{av}) \quad (4.37)$$

De nuevo, el acuerdo entre la teoría y los resultados de la simulación es excelente. Los efectos de tamaño finito, especialmente a densidades grandes, son más evidentes aquí que para las fluctuaciones de la corriente, compárese con la fig. 4.1. Esto es natural puesto que las fluctuaciones de la disipación son muy pequeñas y tienen que ser escaladas como L^5 en el límite continuo, lo que amplifica fuertemente los efectos de tamaño finito que afectan a las medidas de simulación. La fig. 4.2 confirma el escalamiento de las fluctuaciones de la disipación, es decir que $\langle\eta(x,t)\eta(x',t')\rangle \propto L^{-3}$, en el límite continuo, como viene dado por la ec. (4.32).

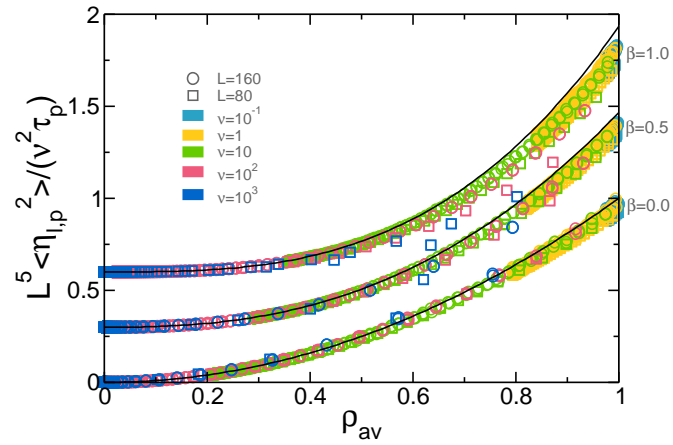


FIGURA 4.2: Comparación entre la medida numérica de la parte diagonal de $\kappa(\rho)$, según la Ec. (4.37), y la predicción teórica de la ec. (4.31a), para $\beta = 0, 0,5, 1$ y diferentes valores de ν y L . Las curvas para $\beta = 0,5$ ($\beta = 1$) se han desplazado verticalmente 0,3 (0,6) unidades para una mayor claridad.

Esto apoya nuestra idea de que las fluctuaciones de la disipación son despreciables en el límite $L \rightarrow \infty$, para el que la única fuente de fluctuaciones relevante será la asociada al campo de corriente.

Capítulo 5

Fluctuaciones raras y típicas en un sistema difusivo con disipación e inyección de energía

5.1. Teoría de las fluctuaciones macroscópicas para sistemas disipativos

En este capítulo analizamos un clase general de sistemas cuya dinámica a escala mesoscópica viene descrita por la siguiente ecuación de evolución fluctuante

$$\partial_t \rho(x, t) = -\partial_x j(x, t) + d(x, t). \quad (5.1)$$

Aquí nos centramos en el caso monodimensional por simplicidad, pero nuestro análisis puede extenderse de modo sencillo al caso general de dimensión d . En la ec. (5.1), $\rho(x, t)$, $j(x, t)$ y $d(x, t)$ son los campos de densidad, corriente y disipación, respectivamente, y $x \in [-1/2, 1/2]$ y t son las variables macroscópicas de espacio y tiempo. Como vimos en los capítulos anteriores, estas escalas espaciales y temporales promediadas emergen del escalamiento adecuado de la dinámica microscópica del sistema [51]. El campo de corriente es una cantidad fluctuante, que se puede escribir como

$$j(x, t) = -D(\rho)\partial_x \rho(x, t) + \xi(x, t). \quad (5.2)$$

El primer término corresponde la ley de Fourier, donde $D(\rho)$ es la difusividad (que puede ser una función no lineal de la densidad local de energía), y $\xi(x, t)$ es el ruido de la corriente que es blanco y gaussiano,

$$\langle \xi(x, t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(x, t) \xi(x', t') \rangle = \frac{\sigma(\rho)}{L} \delta(x - x') \delta(t - t'), \quad (5.3)$$

siendo $\sigma(\rho)$ la movilidad. Se espera que este campo fluctuante gaussiano emerja en la mayoría de las situaciones en el límite mesoscópico apropiado como resultado del teorema del límite central: aunque las interacciones microscópicas para un modelo dado puedan ser tremendamente complicadas, las fluctuaciones resultantes de los campos en la escala hidrodinámica lenta surgen de la suma de una enorme cantidad de eventos aleatorios en la microescala. Esto da lugar a una estadística gaussiana, con una amplitud del orden de $L^{-1/2}$, en el régimen mesoscópico para el que la ec. (5.1) es válida. Por otro lado, el campo de disipación $d(x, t)$ es

$$d(x, t) = -\nu R(\rho(x, t)), \quad (5.4)$$

donde ν es el coeficiente de disipación macroscópico, y $R(\rho)$ es cierta función de la densidad de energía ρ . Para el cálculo que sigue en esta sección, es útil introducir de nuevo la variable y , tal que

$$y = R(\rho), \quad (5.5a)$$

$$d(x, t) = -\nu y(x, t). \quad (5.5b)$$

El campo de disipación aparece a escala mesoscópica porque la dinámica estocástica microscópica es disipativa. Esto es, en los modelos de interés tenemos un coeficiente equivalente al coeficiente de restitución microscópico α , de modo que la cantidad de energía disipada es proporcional a $1 - \alpha$. En consecuencia, el coeficiente de disipación macroscópico ν es también proporcional a $1 - \alpha$. Nótese que, sin embargo, no hay término de ruido en la ec. (5.4): las fluctuaciones locales del campo de disipación están ligadas a las de la densidad de energía ρ . La razón física para ello es que la dinámica microscópica debe de ser cuasielástica para asegurar que la disipación y la difusión tengan lugar sobre la misma escala de tiempo en el límite termodinámico. Típicamente, $1 - \alpha$ debe escalar como L^{-2} , esto es, el orden de magnitud del término difusivo en un sistema de longitud L [45, 51].

Las condiciones de contorno para la ec. (5.1) dependen de la situación física de interés. Por ejemplo, podemos considerar que el sistema permanece en contacto con

dos baños térmicos a $x = \pm 1/2$ a la misma temperatura T , así $\rho(\pm 1/2, t) = T$. En tal caso, el sistema alcanza un estado estacionario en el límite de tiempos grandes, en el que la inyección de energía a través de los contornos y la disipación se compensan en promedio. Los perfiles medios (macroscópicos) solución de (5.1) verifican

$$j'_{\text{av}}(x) + \nu R(\rho_{\text{av}}(x)) = 0, \quad j_{\text{av}}(x) = -D(\rho_{\text{av}}(x))\rho'_{\text{av}}(x), \quad (5.6)$$

donde las primas indican derivada espacial. La primera ecuación en (5.6) se sigue de (5.1), y la segunda es la ley de Fourier para los promedios, obtenida a partir de (5.2). De manera equivalente, podemos escribir una ecuación de segundo orden cerrada para ρ ,

$$\frac{d}{dx} [D(\rho_{\text{av}})\rho'_{\text{av}}] = \nu R(\rho_{\text{av}}), \quad (5.7)$$

con las condiciones de contorno $\rho_{\text{av}}(\pm 1/2) = T$. Las ecuaciones (5.6) y (5.7) se puede escribir también para la variable y introducida en la ecuación (5.5a),

$$j'_{\text{av}}(x) + \nu y_{\text{av}}(x) = 0, \quad j_{\text{av}}(x) = -\hat{D}(y_{\text{av}}(x))y'_{\text{av}}(x), \quad (5.8)$$

con

$$\hat{D}(y) = \left(\frac{dy}{d\rho} \right)^{-1} D(\rho), \quad (5.9)$$

donde

$$j_{\text{av}}(x, t) = -\hat{D}(y_{\text{av}})\partial_x y(x, t). \quad (5.10)$$

De esta forma, vemos que \hat{D} es una “difusividad efectiva”: esto es, el factor que multiplica al gradiente espacial cuando escribimos la ley de Fourier en términos de la nueva variable y . La ec. (5.8) también puede reescribirse como una ecuación diferencial de segundo orden para y_{av} ,

$$\left[\hat{D}(y_{\text{av}})y'_{\text{av}} \right]' = \nu y_{\text{av}}, \quad y_{\text{av}}(\pm 1/2) = R(T). \quad (5.11)$$

De manera interesante, se puede mostrar que \hat{D} es constante, independiente de y , cuando $y = R(\rho)$ depende algebraicamente de ρ (el caso que estudiamos detalladamente en el capítulo 3). Esta observación simplifica considerablemente el análisis, como veremos más adelante.

La probabilidad de observar una historia $\{\rho(x, t), j(x, t)\}_0^\tau$ de duración τ para los campos de densidad y corriente, empezando desde cierto instante inicial $t = 0$, se puede escribir como una integral de camino sobre todas las posibles realizaciones del ruido de la corriente $\{\xi(x, t)\}_0^\tau$, pesada por su medida gaussiana, y restringida sobre las realizaciones compatibles con la ec. (5.1) en cada punto del espacio tiempo

[29]. Esta probabilidad obedece un principio de grandes desviaciones de la forma [9, 10, 14, 21, 27–29, 34, 45]

$$P(\{\rho, j\}_0^\tau) \sim \exp(+L \mathcal{I}_\tau[\rho, j]), \quad (5.12)$$

con un funcional \mathcal{I}_τ dado por [10, 21]

$$\mathcal{I}_\tau[\rho, j] = - \int_0^\tau dt \int_{-1/2}^{1/2} dx \frac{[j + D(\rho)\partial_x \rho]^2}{2\sigma(\rho)}. \quad (5.13)$$

Los campos están $\rho(x, t)$ y $j(x, t)$ acoplados por medio de la ecuación de balance (5.1), y el campo de disipación viene dado como función de $\rho(x, t)$ por (5.4). La ecuación (5.13) expresa la naturaleza gaussiana de las fluctuaciones *locales* de la corriente alrededor de su comportamiento promedio (ley de Fourier). El funcional en la ec. (5.13) es el mismo que en el caso conservativo (es decir, sin disipación en el “bulk”), debido a la cuasielasticidad de la dinámica microscópica. Como demostramos en los capítulos anteriores, esto hace que el ruido de la corriente sea el único relevante en la descripción hidrodinámica. Nosotros nos centramos en las fluctuaciones de la energía disipada en todo el sistema en un intervalo de tiempo τ . Para ello, definimos la disipación integrada d , que es proporcional a la integral del campo de disipación sobre el espacio y el tiempo

$$d = -\frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \int_{-1/2}^{1/2} dx d(x, t) = \frac{\nu}{\tau} \int_0^\tau dt \int_{-1/2}^{1/2} dx R(\rho(x, t)) > 0,$$

donde hemos introducido un signo menos por conveniencia, para que d sea positivo. Como hemos discutido con anterioridad, este es un observable fundamental para entender la física estadística de los medios disipativos. La probabilidad de tal fluctuación $P_\tau(d)$ escala en el límite de tiempos grandes como

$$P_\tau(d) \sim \exp[+\tau L G(d)], \quad G(d) = \frac{1}{\tau} \max_{\rho, j} \mathcal{I}_\tau[\rho, j]. \quad (5.14)$$

Esto define un principio de grandes desviaciones nuevo para d , véase la figura 5.1, tal que $G(d)$ se obtiene de $\mathcal{I}_\tau[\rho, j]$ mediante un cálculo de punto de silla en el límite $L\tau \gg 1$. Para calcular $P_\tau(d)$ hay que sumar (5.14) sobre el subconjunto de perfiles $\{\rho, j\}$ que llevan al valor de d considerado, de modo que en un sistema grande ($L \gg 1$) sólo contribuye el máximo de \mathcal{I}_τ condicionado al valor de la disipación integrada d . En la teoría matemática de las grandes desviaciones, esto se conoce como el principio de contracción de la función de grandes desviaciones original \mathcal{I}_τ [9]. Por tanto, los campos óptimos $\rho_0(x, t; d)$, $j_0(x, t; d)$ son la solución del problema

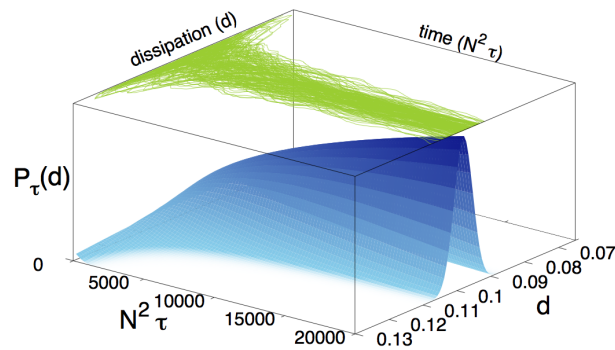


FIGURA 5.1: Convergencia de la disipación integrada en el espacio y en el tiempo a su valor promedio para diferentes realizaciones. También presentamos un esbozo de la concentración de la probabilidad con el tiempo, asociada con el principio de grandes desviaciones.

variacional (5.14) y deben ser consistentes con (i) el valor de la energía disipada d en (5.14), (ii) la ecuación de balance (5.1) y (iii) las condiciones de contorno apropiadas. Estos perfiles óptimos se pueden interpretar como los que adopta el sistema para mantener una fluctuación durante un tiempo dado de la disipación integrada d . Para una mayor sencillez, no introducimos en nuestra notación la dependencia paramétrica de la LDF $G(d)$ y los perfiles óptimos asociados con la temperatura en el contorno T , debemos tener esto en mente para las referencias posteriores a este respecto.

Ahora asumiremos que esos perfiles óptimos no dependen del tiempo. En los sistemas conservativos, se ha demostrado que esta conjetura es equivalente al denominado principio de aditividad [21], introducido para estudiar las fluctuaciones de la corriente en un medio difusivo [27]. La validez de este principio se ha confirmado recientemente mediante simulaciones numéricas para un intervalo grande de fluctuaciones [28, 36], pero hay que tener en cuenta también que puede romperse esta relación para fluctuaciones extremas, por medio de una transición de fase dinámica [24, 30, 35]. Nuestra generalización a sistemas disipativos se basa en la cuasielasticidad de la dinámica microscópica, y su validez se confirmará a posteriori mediante la comparación de las predicciones teóricas con los resultados numéricos. Bajo esta simplificación, la ecuación de balance fluctuante (5.1) se reduce a

$$j'(x) + \nu y(x) = 0, \quad y(x) = -j'(x)/\nu, \quad (5.15)$$

haciendo uso de la variable y definida en la ec. (5.5a). Además, podemos integrar en el tiempo en la definición (5.14) de la disipación integrada d ,

$$d = \nu \int_{-1/2}^{1/2} dx y(x), \quad (5.16a)$$

o, de manera equivalente,

$$d = - \int_{-1/2}^{1/2} dx j'(x) = j(-1/2) - j(1/2) > 0. \quad (5.16b)$$

De esta forma, usando la hipótesis de aditividad, podemos eliminar $\rho(x)$ y escribir $G(d)$ en términos de sólo una variable

$$G(d) = - \min_{j(x)} \mathcal{S}[j], \quad \mathcal{S}[j] = \int_{-1/2}^{1/2} dx \mathcal{L}(j, j' j''), \quad (5.17a)$$

$$\mathcal{L}(j, j', j'') = \frac{[j - \hat{D}(-j'/\nu) \frac{j''}{\nu}]^2}{2\hat{\sigma}(-j'/\nu)}, \quad (5.17b)$$

donde \hat{D} es la difusividad efectiva definida en la ec. (5.9), y $\hat{\sigma}$ es la movilidad, definida en la ec. (5.3), ambas escritas en función de $y = -j'/\nu$. La función $\mathcal{L}(j, j', j'')$ es un Lagrangiano generalizado con dependencia en las primeras y la segundas derivadas, mientras que $\mathcal{S}[j]$ juega el papel de la acción. Si estuviésemos tratando un problema variacional sin restricciones, su solución verificaría la siguiente ecuación generalizada de Euler-Lagrange [52] (véase el apéndice B),

$$\frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial j''} \right) - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial j'} \right) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial j} = 0. \quad (5.18)$$

Sin embargo, el cálculo de $G(d)$ implica la solución de un problema variacional *restringido*, esto es, encontrar el mínimo de $\mathcal{S}[j]$ para el valor de la disipación d considerado. Por lo tanto, debemos utilizar el método de los multiplicadores de Lagrange [52]. Sin embargo, podemos tener en cuenta ciertas consideraciones de simetría para simplificar el análisis y trasladar las restricciones a las condiciones de contorno: presentamos aquí un discusión breve. Como los reservorios de ambos extremos del sistema son idénticos, esperamos que los perfiles óptimos tengan paridad bien definida: $\rho(x)$ debería ser par y $j(x)$ impar como funciones de x . Entonces, la ec. (5.16b) nos muestra que $j(-1/2) = -j(1/2) = d/2$, el valor de la disipación integrada d fija las condiciones de contorno para la corriente. Puede admitirse entonces que la solución del problema variacional para un valor fijado

de d viene dado por la solución de la ecuación de Euler-Lagrange sin restricciones (5.18) con las condiciones de contorno

$$j'(\pm 1/2; d) = -\nu R(T), \quad j(-1/2; d) = -j(1/2; d) = d/2. \quad (5.19)$$

La bondad de este enfoque “naif” se demuestra en los apéndices C y D.

Existe también una descripción Hamiltoniana equivalente para un Lagrangiano con derivadas de segundo orden [53]. De esta forma se obtienen cuatro ecuaciones diferenciales de primer orden que son totalmente equivalentes a la ecuación de Euler-Lagrange de cuarto orden (5.18). El procedimiento matemático completo está en el apéndice E. Por claridad, aquí sólo presentamos los resultados principales. Hemos considerado y y j como las coordenadas canónicas, con la definición apropiada de los momentos conjugados p_y y p_j , tenemos

$$p_y \equiv -\nu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial j''}, \quad p_j = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial j'} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial j''} \right). \quad (5.20)$$

Podemos ver que la definición de p_j nos permite escribir la ecuación de Euler-Lagrange como $dp_j/dx = \partial \mathcal{L}/\partial j$, como en el caso habitual de un Lagrangiano con derivadas de primer orden. El Hamiltoniano se obtiene de la forma usual, $\mathcal{H} = yp_y + jp_j - \mathcal{L}$, con el resultado

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}Q(y)p_y^2 - \hat{D}^{-1}(y)jp_y - \nu yp_j, \quad (5.21a)$$

$$Q(y) \equiv \frac{\hat{\sigma}(y)}{\hat{D}^2(y)}. \quad (5.21b)$$

Los perfiles óptimos se determinan por medio de las cuatro ecuaciones “canónicas” de primer orden,

$$y' = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_y} = Q(y)p_y - \hat{D}^{-1}(y)j, \quad (5.22a)$$

$$j' = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_j} = -\nu y, \quad (5.22b)$$

$$p_y' = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial y} = -\frac{dQ(y)}{dy} \frac{p_y^2}{2} + \frac{d\hat{D}^{-1}(y)}{dy} jp_y + \nu p_j, \quad (5.22c)$$

$$p_j' = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial j} = \hat{D}^{-1}(y)p_y, \quad (5.22d)$$

cuyas condiciones de contorno son

$$y(\pm 1/2) = R(T), \quad j(-1/2) = -j(1/2) = d/2. \quad (5.23)$$

De manera idéntica a lo que se obtiene en la mecánica clásica, se tiene una relación entre los momentos canónicos y las derivadas parciales de la acción $\mathcal{S}[j]$ evaluada sobre la solución del problema variacional (en nuestro caso, los perfiles óptimos; en mecánica, las trayectorias reales),

$$\frac{\partial G}{\partial d} = p_j(1/2), \quad \frac{\partial G}{\partial T} = 2\nu \frac{dR(T)}{dT} p_{j'}(1/2), \quad (5.24)$$

como se muestra en el apéndice D.

La LDF (5.17) se puede escribir ahora en la forma

$$G(d) = - \int_{-1/2}^{1/2} dx \mathcal{L} = - \frac{1}{2} \int_{-1/2}^{1/2} dx Q(y) p_y^2, \quad (5.25)$$

donde y y p_y están evaluados sobre las soluciones de las ecuaciones canónicas para el valor dado de d . Además, hemos usado la expresión del Lagrangiano en función de las variables canónicas, $\mathcal{L} = Q(y) p_y^2 / 2$, que se deduce en el apéndice E. Hay que destacar que las ecuaciones canónicas (5.22) tienen una solución particular con momentos canónicos nulos, $p_y = 0$ y $p_j = 0$ para todo x , que lleva a una $G(d)$ nula también y, por tanto, al comportamiento promedio. De hecho, sustituir $p_y = 0$ y $p_j = 0$ en (5.22) implica que $y' = -j/\hat{D}(y)$, $j' = -\nu y$, lo que es equivalente a la ecuación (5.11) para los perfiles promedio. El valor correspondiente para la disipación integrada d_{av} resulta

$$d_{\text{av}} = \nu \int_{-1/2}^{1/2} dx y_{\text{av}}(x) = 2j_{\text{av}}(-1/2). \quad (5.26)$$

Un modo alternativo de encontrar el comportamiento promedio es pensar que el mismo está asociado a la solución del problema variacional sin restricciones, esto es, sin fijar un valor dado de d . Por otra parte, en ese caso, sólo los valores de ρ (ó y) están fijados en los contornos y puede parecer que faltan condiciones para resolver el problema variacional. Sin embargo, como se discute en [53], la propia deducción de las ecuaciones canónicas (o de la ecuación de Euler-Lagrange equivalente) proporciona la solución: si una variable canónica (en nuestro caso sería la j) no está fijada en los extremos del intervalo, su momento canónico asociado (en nuestro caso p_j) debe anularse en los contornos. Una mirada rápida a las ecuaciones (5.22) nos dice que la solución compatible con estas condiciones de contorno es aquella en la que tanto p_y como p_j son nulos en todo el intervalo.

5.2. Análisis de la función de grandes desviaciones en algunos casos límite

En las siguientes subsecciones de este capítulo, analizamos la forma de la LDF en algunos límites de interés, para los cuales encontramos algunos resultados generales. Primero, estudiamos el comportamiento de $G(d)$ para fluctuaciones pequeñas alrededor del promedio, donde esperamos un comportamiento cuadrático de la LDF (correspondiente a las fluctuaciones gaussianas). Luego analizamos el límite de sistemas débilmente disipativos, $\nu \ll 1$, para el cual un desarrollo perturbativo adecuado nos permite obtener un escalamiento no trivial de la LDF. Finalmente, consideramos el límite opuesto de sistemas fuertemente disipativos, $\nu \gg 1$, para los que encontramos un escalamiento diferente de la LDF.

5.2.1. Fluctuaciones pequeñas alrededor del promedio

Hemos visto que el comportamiento promedio se corresponde con la solución particular de las ecuaciones canónicas cuando se anulan los momentos conjugados $p_j = 0$, $p_\rho = 0$. Por tanto, las fluctuaciones pequeñas pueden analizarse asumiendo que estos son pequeños. Definamos el parámetro adimensional

$$\epsilon = \frac{d - d_{\text{av}}}{d_{\text{av}}} \quad (5.27)$$

para medir la separación de la disipación integrada respecto a su promedio d_{av} . Como hemos discutido, los momentos canónicos se anulan para $\epsilon = 0$. Escribimos entonces

$$y = y_{\text{av}} + \epsilon \Delta y, \quad j = j_{\text{av}} + \epsilon \Delta j, \quad p_y = \epsilon \Delta p_y, \quad p_j = \epsilon \Delta p_j, \quad (5.28)$$

y linealizamos las ecs. (5.22) alrededor de la solución promedio, es decir, nos quedamos sólo con los términos lineales en ϵ . Entonces,

$$\Delta y' = Q(y_{\text{av}}) \Delta p_y - \hat{D}^{-1}(y_{\text{av}}) \Delta j - j_{\text{av}} \frac{d\hat{D}^{-1}(y_{\text{av}})}{dy_{\text{av}}} \Delta y, \quad (5.29a)$$

$$\Delta j' = -\nu \Delta y, \quad (5.29b)$$

$$\Delta p_y' = j_{\text{av}} \frac{d\hat{D}^{-1}(y_{\text{av}})}{dy_{\text{av}}} \Delta p_y + \nu \Delta p_j, \quad (5.29c)$$

$$\Delta p_j' = \hat{D}^{-1}(y_{\text{av}}) \Delta p_y. \quad (5.29d)$$

Las condiciones de contorno para estas ecuaciones son $\Delta y(\pm 1/2) = 0$, $\Delta j(-1/2) = -\Delta j(1/2) = d_{\text{av}}/2$. La solución de este sistema de ecuaciones la introducimos en la ec. (5.25) para la LDF, y obtenemos

$$G(d) \sim -\frac{\epsilon^2}{2} \int_{-1/2}^{1/2} dx Q(y_{\text{av}}) \Delta p_y^2, \quad (5.30)$$

para fluctuaciones pequeñas de la disipación alrededor del promedio. Teniendo en cuenta (5.27) y el principio de grandes desviaciones (5.14), esto significa que la probabilidad de las fluctuaciones pequeñas de la disipación integrada d es aproximadamente gaussiana,

$$P_\tau(d) \propto \exp \left[-L\tau \frac{(d - d_{\text{av}})^2}{2d_{\text{av}}^2 \Lambda_\nu^2} \right], \quad |\epsilon| \ll 1, \quad (5.31)$$

con Λ_ν^2 dado por

$$\Lambda_\nu^2 = \left(\int_{-1/2}^{1/2} dx Q(y_{\text{av}}) \Delta p_y^2 \right)^{-1}. \quad (5.32)$$

De esta forma, la estimación gaussiana para la desviación estándar de la disipación, viene dada por $\chi \equiv d_{\text{av}} \Lambda_\nu / \sqrt{\tau L}$. Para hacer un estudio más detallado de la LDF, tenemos que tener en cuenta la dependencia concreta con la densidad ρ de la difusividad D , la movilidad σ y el coeficiente de transporte de la disipación R . Esto lo haremos en la siguiente sección de este capítulo, donde consideramos la misma familia general de modelos considerados en la sección (3.3). Por otro lado, es importante resaltar que la estadística gaussiana se espera sólo para fluctuaciones pequeñas alrededor de los promedios. En general, la solución al problema variacional dado por la integración de la ec. (5.22), cuando lo insertemos en (5.25), nos dará como resultado una estadística no gaussiana (es decir, una dependencia no cuadrática de la LDF) para una fluctuación arbitraria de la energía disipada d .

5.2.2. Sistemas débilmente disipativos $\nu \ll 1$

Ahora analizaremos las ecuaciones canónicas (5.22) en el límite $\nu \ll 1$. Un desarrollo regular en potencias de ν falla, puesto que no es posible imponer la condición de contorno para la corriente. Esta singularidad del límite elástico es de esperar desde un punto de vista físico: no es posible obtener el comportamiento de disipación débil ($\nu \ll 1$) como una corrección alrededor del caso conservativo $\nu = 0$, para el que $\rho(x) = T$ y $j(x) = 0$. Por lo tanto, es necesario un análisis de perturbaciones singulares, buscando un reescalamiento adecuado de las variables. La

ecuación (5.8) para los promedios implica que

$$y_{\text{av}} = R(T) + \mathcal{O}(\nu), \quad j_{\text{av}} = -\nu R(T)x + \mathcal{O}(\nu^2), \quad \nu \ll 1. \quad (5.33)$$

Lógicamente, la corriente promedio tiende a cero linealmente con ν en el límite $\nu \rightarrow 0^+$. Además, combinando las ecs. (5.26) y (5.33), obtenemos la disipación promedio,

$$d_{\text{av}} = \nu R(T) + \mathcal{O}(\nu^2). \quad (5.34)$$

Por consiguiente, tiene sentido proponer las siguientes variables reescaladas

$$j(x) = \nu\psi(x), \quad p_j(x) = \frac{\Pi_\psi(x)}{\nu}, \quad (5.35)$$

lo cual es consistente con las ecuaciones canónicas (5.22), donde

$$\psi' = \frac{1}{\nu}j' = \frac{1}{\nu} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_j} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \Pi_\psi}, \quad (5.36a)$$

$$\Pi'_\psi = \nu p'_j = -\nu \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial j} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \psi}, \quad (5.36b)$$

con el mismo Hamiltoniano \mathcal{H} . Dicho de otra forma, la ec. (5.35) define una “transformación canónica” del par de variables conjugadas $\{j, p_j\}$ a $\{\psi, \Pi_\psi\}$, una transformación que soluciona el problema del comportamiento singular en el límite $\nu \rightarrow 0^+$. El Hamiltoniano lo podemos escribir ahora como

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}Q(y)p_y^2 - y\Pi_\psi - \nu \hat{D}(y)^{-1}\psi p_y, \quad (5.37)$$

en las variables reescaladas. Nótese que la transformación introducida es esencial para obtener el “balance dominante” correcto [54] al orden más bajo. En particular, antes del reescalamiento, el término proporcional a yp_j era del orden de ν y el término proporcional a jp_y era de orden unidad; después del reescalamiento los órdenes de magnitud se intercambian, el término proporcional a $y\Pi_\psi$ es de el orden de la unidad mientras que el término proporcional a ψp_y es del orden de ν .

Comenzamos estudiando el Hamiltoniano a orden cero, sustituyendo $\nu = 0$ en la ec (5.37),

$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2}Q(y)p_y^2 - y\Pi_\psi. \quad (5.38)$$

A partir de él, las ecuaciones canónicas al orden más bajo son

$$y' = \frac{\partial \mathcal{H}_0}{\partial p_y} = Q(y)p_y, \quad (5.39a)$$

$$p'_y = -\frac{\partial \mathcal{H}_0}{\partial y} = -\frac{1}{2} \frac{dQ(y)}{dy} p_y^2 + \Pi_\psi, \quad (5.39b)$$

$$\psi' = \frac{\partial \mathcal{H}_0}{\partial \Pi_\psi} = -y, \quad (5.39c)$$

$$\Pi'_\psi = -\frac{\partial \mathcal{H}_0}{\partial \psi} = 0. \quad (5.39d)$$

Para no complicar nuestras fórmulas, no introduciremos una notación diferente para las variables canónicas al orden más bajo, aunque las ecuaciones canónicas aproximadas (con \mathcal{H}_0) son diferentes de las exactas (con \mathcal{H}). Sólo tenemos que recordar que nuestros resultados son válidos al orden más bajo en ν . Las ecuaciones canónicas aproximadas (5.39) tienen las siguientes condiciones de contorno

$$y(\pm 1/2) = R(T), \quad \psi(-1/2) = -\psi(1/2) = \Delta/2, \quad (5.40)$$

donde

$$\Delta = \frac{d}{\nu} = R(T) \frac{d}{d_{\text{av}}} \quad (5.41)$$

asumimos que es de orden unidad; esto es, $d = \mathcal{O}(\nu)$ o $d/d_{\text{av}} = \mathcal{O}(1)$. Así, nuestro reescalamiento nos permite obtener una solución para los perfiles óptimos $\{\rho, j\}$ de la densidad y la corriente, teniendo en cuenta que $y = R(\rho)$ y $j = \nu\psi$, para una disipación integrada d muy diferente de su valor promedio d_{av} .

Es necesario comentar que ψ es una variable cíclica y, por tanto, su momento conjugado es constante, $\Pi_\psi \equiv \Pi_{\psi 0} = \text{const.}$, véase la ec. (5.39d). Esta integral primera puede usarse para obtener una ecuación diferencial de primer orden cerrada para $y(x)$ en el límite $\nu \ll 1$. Además, del reescalamiento de la ec. (5.24) se deduce que

$$\Pi_{\psi 0} = \frac{\partial G}{\partial \Delta}, \quad (5.42)$$

lo que nos da una interpretación física de esta integral primera de las ecuaciones canónicas aproximadas: es la derivada parcial de la LDF con respecto a la disipación reescalada. El Hamiltoniano \mathcal{H}_0 también una integral primera, ya que no depende explícitamente de x . Combinando las ecs. (5.38) y (5.39a),

$$y'^2 = 2Q(y)(\mathcal{H}_0 + y\Pi_{\psi 0}), \quad y(\pm 1/2) = R(T). \quad (5.43)$$

Una vez resuelta esta ecuación, la corriente reescalada ψ se puede obtener de (5.39c)

$$\psi' = -y, \quad \psi(-1/2) = -\psi(1/2) = R(T) \frac{d}{2d_{av}}, \quad (5.44)$$

así que las dos constantes \mathcal{H}_0 y Π_{ψ_0} vendrán dadas en términos de la temperatura T y d/d_{av} . No hay más constantes que ajustar en las soluciones de las ecuaciones (5.43) y (5.44) debido a la paridad de (y, ψ) : y es una función par de x y ψ es una función impar en el intervalo $[-1/2, 1/2]$. Por supuesto, los perfiles promedio $y_{av}(x)$ y $j_{av}(x)$ se reobtienen de las ecuaciones canónicas sustituyendo en ellas $\Pi_{\psi} = 0$ y $p_y = 0$. La ecuación (5.38) implica que $\mathcal{H}_0 = 0$ si consideramos los perfiles promedio¹.

La forma sencilla de la ecuación diferencial (5.43) nos permite inferir algunas propiedades del perfil óptimo $y(x)$ asociado a un valor dado de la disipación integrada. En primer lugar, nótese que en general la solución de la ec. (5.43) será no monótona, mostrando un máximo en el intervalo $x \in [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$. Además, si tenemos en cuenta que la función $Q(y)$ es definida positiva, se sigue que los perfiles en el extremo tomarán un valor único

$$y_0 \equiv -\frac{\mathcal{H}_0}{\Pi_{\psi_0}}. \quad (5.45)$$

Para $d \neq d_{av}$, se tiene que $\Pi_{\psi_0} \neq 0$, de modo que y_0 está bien definido. Además, $\Pi_{\psi_0} \neq 0$ debe tener diferente signo que \mathcal{H}_0 , $\text{sgn}(\Pi_{\psi_0}) \neq \text{sgn}(\mathcal{H}_0)$, ya que $y(x) > 0$, $\forall x$. También es claro que el perfil óptimo $y(x)$ sólo puede tener un único extremo (máximo o mínimo), localizado en $x = 0$ por razones de simetría. Escribiendo la ec. (5.43) como

$$y'^2 = 2Q(y)\mathcal{H}_0 \left(1 - \frac{y}{y_0}\right) \quad (5.46)$$

concluimos que las constantes \mathcal{H}_0 e $y_0 - y(x)$ deben tener el mismo signo $\forall x \in [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$. Así, para $\mathcal{H}_0 > 0$ el perfil $y(x)$ tiene un único máximo, $y(x) > y(\pm 1/2) = R(T)$, $\forall x$, y de esta forma $d > d_{av}$. Por otro lado, $\mathcal{H}_0 < 0$ implica un único mínimo, $y(x) < R(T)$, $\forall x$, y $d < d_{av}$. Todas estas propiedades las veremos más adelante con ejemplos concretos, tanto analíticos como numéricos.

De forma interesante, el término dominante en el comportamiento de la LDF también puede obtenerse en términos de las integrales primeras \mathcal{H}_0 y Π_{ψ_0} . De

¹El Hamiltoniano exacto \mathcal{H} también se anula sobre la solución promedio, como se ve a partir de la ecuación (5.37).

hecho

$$G(d) \sim -\frac{1}{2} \int_{-1/2}^{1/2} dx Q(y) p_y^2 = -\frac{1}{2} \int_{-1/2}^{1/2} dx \frac{y'^2}{Q(y)}, \quad (5.47)$$

y haciendo uso de la ec. (5.43),

$$\begin{aligned} G(d) &\sim - \left(\mathcal{H}_0 + \Pi_{\psi_0} \int_{-1/2}^{1/2} dx y(x) \right) \\ &= -(\mathcal{H}_0 + \Pi_{\psi_0} \Delta) = -\mathcal{H}_0 \left(1 - \frac{\Delta}{y_0} \right). \end{aligned} \quad (5.48)$$

Por tanto, sólo nos queda escribir las constante \mathcal{H}_0 e y_0 (o de manera equivalente \mathcal{H}_0 y Π_{ψ_0}) en términos de la disipación integrada d y de la temperatura T en los contornos. Una vez hecho esto, la LDF se obtiene de la expresión dada por la ec. (5.48). Además, podemos acotar los extremos de los perfiles y_0 teniendo en cuenta que $G(d) < 0$ para $d \neq d_{av}$: (i) para $\mathcal{H}_0 > 0$ sabemos que y_0 es un máximo, pero además $G(d) < 0$ implica que $y_0 > \Delta$, (ii) para $\mathcal{H}_0 < 0$ sabemos que y_0 se corresponde con un mínimo, que ha de verificar $y_0 < \Delta$. También podemos usar la ec. (5.48) junto con la ec. (5.42) para obtener una relación sencilla entre \mathcal{H}_0 , G y $\partial G/\partial d$, esto es

$$-\mathcal{H}_0 = G + \Delta \frac{\partial G}{\partial \Delta} = G(d) + d \frac{\partial G(d)}{\partial d} = \text{const.} \quad (5.49)$$

Debemos resaltar que esta relación es únicamente válida para sistemas débilmente disipativos, en el sentido de que el coeficiente de disipación macroscópico es pequeño, $\nu \ll 1$, y para valores de la disipación integrada d tales que $d = \mathcal{O}(d_{av})$.

Para muchos sistemas de interés, la función $Q(y)$ es típicamente un función homogénea de y de grado γ ,

$$Q(cy) = c^\gamma Q(y), \quad (5.50)$$

donde c es un número real arbitrario, esto es, $Q(y) \propto y^\gamma$. Este tipo de dependencia es común en muchos sistemas disipativos con inyección de energía, como distintos sistemas de reacción-difusión [55] o la familia general de modelos que hemos presentado en el capítulo anterior. Sin embargo, es importante resaltar que no todos los sistemas físicos obedecen esta condición de homogeneidad. Por ejemplo, el proceso de exclusión simple asimétrico (asymmetric simple exclusion process) tiene una $Q(y)$ no homogénea [10, 43]. Introduciendo el escalamiento

$$y(x) = R(T)Y(x), \quad y_0 = R(T)Y_0, \quad \mathcal{H}_0 = R(T)^{2-\gamma} \tilde{\mathcal{H}}, \quad (5.51)$$

la ec. (5.43) se transforma en

$$Y'(x)^2 = 2\tilde{\mathcal{H}}Q(Y) \left(1 - \frac{Y(x)}{Y_0}\right), \quad Y(\pm 1/2) = 1. \quad (5.52)$$

Esta transformación es muy natural: escalamos la variable y con su valor $R(T)$ en los contornos. Introducimos un escalamiento análogo para la corriente,

$$\psi(x) = R(T)\Psi(x), \quad \Psi'(x) = -Y(x), \quad (5.53a)$$

$$\Psi(-1/2) = \Psi(1/2) = \frac{\Delta}{2R(T)} = \frac{d}{2d_{\text{av}}}. \quad (5.53b)$$

La solución (par) de la ec. (5.52) tiene la forma

$$Y = Y(x, \tilde{\mathcal{H}}, Y_0). \quad (5.54)$$

Como dijimos antes, no hay mas constantes de integración cuando resolvemos las ecs. (5.52)-(5.53), donde Y (respectivamente Ψ) es una función par (resp. impar) de x . Las condiciones de contorno para Y ,

$$Y(x = 1/2, \tilde{\mathcal{H}}, Y_0) = 1, \quad (5.55)$$

implican que $Y_0 = Y_0(\tilde{\mathcal{H}})$, el máximo escalado Y_0 es función sólo del hamiltoniano escalado $\tilde{\mathcal{H}}$. Ahora, teniendo en cuenta que la solución (impar) de la ec. (5.53) tiene la forma

$$\Psi = \Psi(x, \tilde{\mathcal{H}}, Y_0), \quad (5.56)$$

tenemos que

$$\Psi(x = -1/2, \tilde{\mathcal{H}}, Y_0(\tilde{\mathcal{H}})) = \frac{d}{2d_{\text{av}}}. \quad (5.57)$$

Por consiguiente,

$$\tilde{\mathcal{H}} = \tilde{\mathcal{H}} \left(\frac{d}{d_{\text{av}}} \right), \quad (5.58)$$

esto quiere decir que $\tilde{\mathcal{H}}$ es función sólo de la disipación integrada d relativa a su valor promedio d_{av} .

Esta observación se usará en lo que sigue para encontrar un escalamiento para la LDF de la disipación. De hecho, la ec. (5.48) se puede reescribir como

$$R(T)^{\gamma-2}G(d) \sim - \left[1 - \frac{d/d_{\text{av}}}{Y_0(\tilde{\mathcal{H}})} \right] \tilde{\mathcal{H}} \quad (5.59)$$

La ecuación anterior da el escalamiento general de la LDF para sistemas débilmente disipativos. En el límite $\nu \ll 1$ donde tanto $\tilde{\mathcal{H}}$ como Y_0 son funciones únicamente de d/d_{av} ,

$$\left(\frac{d_{\text{av}}}{\nu}\right)^{\gamma-2} G(d) = - \left[1 - \frac{d/d_{\text{av}}}{Y_0(\tilde{\mathcal{H}})}\right] \tilde{\mathcal{H}} \quad (5.60)$$

es sólo función de d/d_{av} (hemos usado aquí la ec. (5.34) para $R(T)$). Este es un resultado importante: significa que, para cada valor de γ , todas las curvas de $(d/d_{\text{av}})^{\gamma-2}G(d)$ representadas como función de d/d_{av} se superponen en una curva “maestra” para todos los valores del coeficiente de disipación ν , para sistemas débilmente disipativos ($\nu \ll 1$). La única hipótesis necesaria es que $Q(y)$ sea una función homogénea de y de grado arbitrario γ . Es importante resaltar que la ecuación diferencial (5.52) para $Y(x)$ contiene la función $Q(Y)$, que tiene como parámetro a γ . Así, (Y, Ψ) y el segundo miembro de la ecuación (5.60) también contiene como parámetro a γ ; en principio, cada modelo físico (correspondiente a cierto valor de γ) tendrá una función $Q(y)$ distinta y por tanto un escalamiento diferente. La situación más sencilla aparece cuando $\gamma = 2$, en tal caso la ec. (5.60) predice que $G(d)$ sólo es función de la disipación relativa d/d_{av} , sin dependencia adicional en ν .

Finalmente, es interesante resaltar que los perfiles óptimos y y ψ también poseen un escalamiento simple. De hecho, la ec. (5.54), junto con (5.51), implican que

$$y(x) = \frac{d_{\text{av}}}{\nu} Y(x, \tilde{\mathcal{H}}, Y_0(\tilde{\mathcal{H}})). \quad (5.61)$$

Por otro lado, la ec. (5.56), junto con las ecuaciones (5.53), **llevan a**

$$\psi(x) = \frac{d_{\text{av}}}{\nu} \Psi(x, \tilde{\mathcal{H}}, Y_0(\tilde{\mathcal{H}})). \quad (5.62)$$

En consecuencia, si representamos como función de x los perfiles óptimos de densidad y corriente $y(x)$ y $\psi(x)$ multiplicados por ν/d_{av} (esto es, divididos por $R(T)$), colapsan en una única curva los correspondientes a un valor dado de d/d_{av} , independientemente del valor del coeficiente de disipación macroscópico ν . Igual que para la LDF, estas curvas maestras son diferentes para distintos valores de γ , el grado de homogeneidad de $Q(y)$. De las ecuaciones (5.61) y (5.62), se obtienen directamente los perfiles óptimos para la densidad de energía y la corriente, ya que $y = R(\rho)$ y $j = \nu\psi$. Por otro lado, las integrales primeras \mathcal{H}_0 y Π_{ψ_0} se deducen a

partir de las ecs. (5.45) y (5.51),

$$\mathcal{H}_0 = \left(\frac{d_{\text{av}}}{\nu} \right)^{2-\gamma} \tilde{\mathcal{H}}, \quad \Pi_{\psi_0} = - \left(\frac{d_{\text{av}}}{\nu} \right)^{1-\gamma} \frac{\tilde{\mathcal{H}}}{Y_0(\tilde{\mathcal{H}})}. \quad (5.63)$$

5.2.3. Sistemas fuertemente disipativos $\nu \gg 1$

Ahora procedemos a analizar el límite $\nu \gg 1$, es decir, el límite donde la dinámica es fuertemente disipativa. La ec. (5.11) para el perfil promedio implica que $y_{\text{av}}(x)$ posee dos capas límite de espesor $\ell_\nu \sim \nu^{-1/2}$ cerca de $x = \pm 1/2$, donde estará localizada la mayor parte de la energía del sistema. Esto es razonable desde un punto de vista físico: para $\nu \gg 1$ se espera que la inyección de energía a través de los contornos esté limitada a las regiones cercanas a ellos. Entonces, la mayor parte de la energía se disipa antes de alcanzar el seno del sistema, y de modo efectivo el sistema se desacopla en dos mitades independientes. Esta imagen puede usarse para simplificar la integración de las ecuaciones canónicas del sistema (5.22): podemos restringirnos a la mitad del sistema $x \in [-1/2, 0]$ y utilizar las condiciones de contorno

$$y(-1/2) = R(T), \quad j(-1/2) = d/2, \quad y'(0) = 0, \quad j(0) = 0, \quad (5.64)$$

debido a la simetría de las soluciones del problema variacional (y par, j impar). Ahora, introduciendo el siguiente escalamiento (sugerido por la escala de longitud típica $\ell_\nu \propto \nu^{-1/2}$),

$$j = \sqrt{\nu}\psi, \quad X = \sqrt{\nu} \left(x + \frac{1}{2} \right), \quad p_y = \sqrt{\nu}\Pi_y, \quad (5.65)$$

obtenemos el sistema de ecuaciones equivalente

$$\frac{dy}{dX} = Q(y)\Pi_y - \hat{D}^{-1}(y)\psi, \quad (5.66a)$$

$$\frac{d\psi}{dX} = -y, \quad (5.66b)$$

$$\frac{d\Pi_y}{dX} = -\frac{dQ(y)}{dy} \frac{\Pi_y^2}{2} + \frac{d\hat{D}^{-1}(y)}{dy} \psi \Pi_y + p_j, \quad (5.66c)$$

$$\frac{dp_j}{dX} = \hat{D}^{-1}(y)\Pi_y \quad (5.66d)$$

con las condiciones de contorno

$$y(X=0) = R(T), \quad \left. \frac{dy}{dX} \right|_{X=\sqrt{\nu}/2} = 0, \quad (5.67a)$$

$$\psi(X=0) = \frac{d}{2\sqrt{\nu}}, \quad \psi(X=\sqrt{\nu}/2) = 0. \quad (5.67b)$$

De manera interesante, ν no aparece explícitamente en las ecuaciones canónicas reescaladas (5.66), sólo lo hace en las condiciones de contorno. Por tanto, en el límite $\nu \rightarrow \infty$ tenemos que resolver (5.66) con las condiciones de contorno

$$y(X=0) = R(T), \quad \psi(X=0) = \tilde{d}, \quad (5.68a)$$

$$\lim_{X \rightarrow \infty} \frac{dy}{dX} = 0, \quad \lim_{X \rightarrow \infty} \psi = 0. \quad (5.68b)$$

donde hemos definido

$$\tilde{d} = \frac{d}{2\sqrt{\nu}}, \quad (5.69)$$

que asumimos que es de orden unidad. De hecho, de la ecuación (5.16) se obtiene

$$d = 2\nu \int_{-1/2}^0 dx y(x) = 2\sqrt{\nu} \int_0^{\sqrt{\nu}/2} dX y(X), \quad (5.70)$$

esto es,

$$\tilde{d} \sim \int_0^{\infty} dX y(X), \quad \nu \gg 1. \quad (5.71)$$

En este régimen de disipación grande, las ecuaciones canónicas no se simplifican, pero emerge una imagen física interesante: el sistema se desacopla en dos capas independientes de grosor $\ell_\nu = \mathcal{O}(\nu^{-1/2})$ cerca de los contornos, donde la variable reescalada $X = \mathcal{O}(1)$ ². Además, un escalamiento simple se puede deducir para la LDF $G(d)$, a partir de la ec. (5.25),

$$G(d) = - \int_{-1/2}^0 dx Q(y) p_y^2 \sim -\sqrt{\nu} \int_0^{\infty} dX Q(y) \Pi_y^2. \quad (5.72)$$

En esta expresión, y y Π_y son soluciones de (5.66) con las condiciones de contorno (5.68). Por lo tanto, ambos dependen de $R(T)$ y \tilde{d} a través de las condiciones de contorno, y $G(d) = \sqrt{\nu} F(R(T), \tilde{d})$, donde F es cierta función.

Una situación especialmente simple aparece cuando la movilidad $\sigma(y)$ y la difusividad $D(y)$ son proporcionales a una potencia de y , de modo que (i) la función

²nos hemos restringido a el semiintervalo $[-1/2, 0]$, para la solución del intervalo restante podemos usar de nuevo los mismos argumentos de simetría

$Q(y)$ es homogénea, $Q(y) \propto y^\gamma$, como en la ec. (5.50), y (ii) la difusividad efectiva \hat{D} no depende de y , $\hat{D}(y) = \hat{D} = \text{const.}$. De hecho, este es el caso para la clase de modelos que desarrollamos en los capítulos anteriores. La disipación promedio para $\nu \gg 1$ es

$$d_{\text{av}} \sim 2\sqrt{\nu\hat{D}}R(T) \Rightarrow \tilde{d} = \sqrt{\hat{D}}R(T)\frac{d}{d_{\text{av}}}. \quad (5.73)$$

Las ecuaciones canónicas (5.66) se pueden analizar siguiendo un razonamiento similar al utilizado en el límite de sistemas débilmente disipativos. Obviando los detalles, presentamos aquí directamente la LDF, que resulta

$$G(d) = -\sqrt{\frac{\nu}{\hat{D}}} \mathcal{F}\left([R(T)]^{\gamma-2}, \frac{d}{d_{\text{av}}}\right), \quad (5.74)$$

donde \mathcal{F} es cierta función, que no necesitamos conocer (esto exigiría la resolución de las ecuaciones canónicas) para discutir el escalamiento de la LDF, que es mas complejo que el del caso de disipación débil. Por ejemplo, es el caso de $\gamma = 2$ tendremos que $G(d) = \sqrt{\nu/\hat{D}} \mathcal{F}(1, d/d_{\text{av}})$, así que las curvas de la LDF, una vez reescaladas con $(\hat{D}/\nu)^{1/2}$, colapsan para todo $\nu \gg 1$ cuando las representamos como una función de la disipación relativa d/d_{av} . El factor $\sqrt{\nu}$ delante de la función escalada da cuenta de la supresión fuerte de las fluctuaciones de la disipación en los sistemas con disipación grande: para un valor dado de la disipación relativa d/d_{av} , la probabilidad de tal fluctuación decrece exponencialmente con $\sqrt{\nu}$.

5.3. Grandes desviaciones de la energía disipada

Para investigar en detalle la validez del marco general para el estudio de las fluctuaciones presentado en la sección anterior, lo particularizaremos para la clase general de modelos presentados en el capítulo 1. En ella, analizaremos explícitamente las fluctuaciones típicas y raras de la disipación integrada d , utilizando técnicas de perturbaciones singulares y de simulación de Monte Carlo avanzadas. Antes de pasar a este análisis, recordemos que la probabilidad de un cierto valor de la disipación integrada obedece un principio de grandes desviaciones $\mathcal{P}_\tau(d) \sim \exp[+\tau L G(d)]$, donde la LDF $G(d)$ se obtiene solucionando el problema variacional de los perfiles óptimos $\{\rho(x; d), j(x; d)\}$ que mantienen la fluctuación considerada. Así, $G(d)$ viene dada por la ec. (5.25), siendo $\{y(x), p_y(x)\}$ las soluciones de las ecuaciones canónicas (5.22) con las condiciones de contorno apropiadas,

$$y(\pm 1/2) = T^{1+\beta}, \quad j(-1/2) = -j(1/2) = \frac{d}{2}, \quad (5.75)$$

que particularizan la ec. (5.23) para nuestra familia de modelos. También tenemos que calcular la función $Q(y)$ que aparece en el Hamiltoniano, ec. (5.21a). Usando la ec. (3.60) junto con la ec. (5.21b),

$$Q(y) = \frac{\hat{\sigma}(y)}{\hat{D}^2} = \frac{12(1+\beta)^2}{3+\beta} y^{\frac{2+\beta}{1+\beta}}. \quad (5.76)$$

La principal simplificación con respecto al caso general considerado en la sección (5.1), viene de que \hat{D} es constante y no función de y . La función $Q(y)$ es proporcional a la movilidad $\sigma(y)$ y, además, es una función homogénea de grado γ ,

$$Q(y) = c y^\gamma, \quad \gamma = \frac{2+\beta}{1+\beta}, \quad (5.77)$$

con $c = 12(1+\beta)^2/(3+\beta)$. El parámetro γ varia desde $\gamma = 2$ para $\beta = 0$, que corresponde al modelo KMP disipativo, hasta $\gamma = 1$ para el límite $\beta \rightarrow \infty$. Por supuesto, como en el caso general, las ecuaciones canónicas tienen una solución particular con los momentos nulos, $p_y = 0$, $p_j = 0$,

$$y' = -\frac{j}{\hat{D}}, \quad j' = -\nu y, \quad (5.78)$$

que es de nuevo la particularización de la ec. (5.8) para nuestra familia de modelos. Sus soluciones son los perfiles promedio, que vienen dados por la ecs. (3.61a) y (3.61b).

5.3.1. Comportamiento gaussiano y fluctuaciones típicas

Como hemos descrito en la sección 5.2.1, esperamos la existencia de fluctuaciones gaussianas para pequeñas desviaciones alrededor de la disipación promedio. De la ec. (5.26), y haciendo uso de la ec. (3.61a), la disipación promedio es

$$d_{\text{av}} = \nu \int_{-1/2}^{1/2} dx y_{\text{av}}(x) = T^{1+\beta} \sqrt{4\nu\hat{D}} \tanh \sqrt{\frac{\nu}{4\hat{D}}}. \quad (5.79)$$

Siguiendo la teoría general, las fluctuaciones pequeñas se corresponden con momentos canónicos pequeños, ya que el comportamiento promedio se obtiene para $p_y = 0$, $p_j = 0$. Linealizamos las ecuaciones canónicas introduciendo el parámetro $\epsilon = (d - d_{\text{av}})/d_{\text{av}} \ll 1$: escribimos las variables canónicas como sus promedios más una corrección en ϵ , véase la ec. (5.28). A primer orden en ϵ , tenemos el siguiente

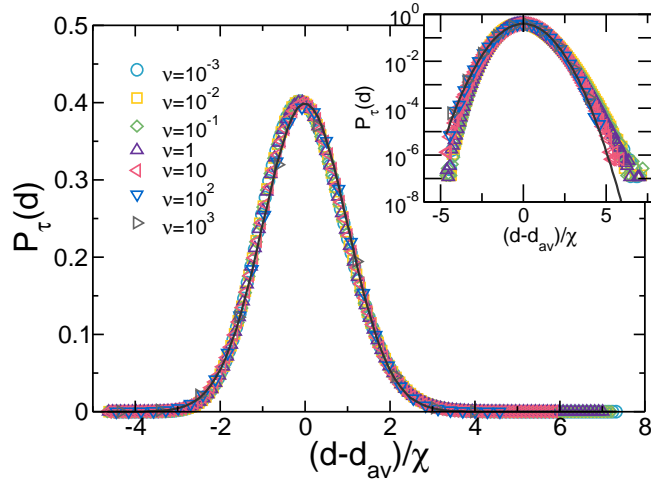


FIGURA 5.2: Distribución de probabilidad de la disipación integrada d , integrada en el espacio y el tiempo τ , representada frente a la variable reducida $(d - d_{av})/\chi$ (de varianza unidad) para diferentes valores de $\nu \in [10^{-3}, 10^3]$, para el caso $\beta = 0$. Recuadro: gráfica semilog con los mismos datos. En ambos casos la línea es la distribución gaussiana, que ajusta bien los datos para las fluctuaciones típicas. Por otra parte, se observa cierta asimetría en las colas, que comienzan a alejarse del comportamiento gaussiano.

conjunto de ecuaciones

$$\Delta y' = Q(y_{av})\Delta p_y - \frac{1}{\hat{D}}\Delta j, \quad (5.80a)$$

$$\Delta j' = -\nu\Delta y, \quad (5.80b)$$

$$\Delta p'_y = \nu\Delta p_j, \quad (5.80c)$$

$$\Delta p'_j = \frac{1}{\hat{D}}\Delta p_y, \quad (5.80d)$$

que particularizan la ec. (5.29) para nuestra familia de modelos. Las condiciones de contorno son $\Delta y(\pm 1/2) = 0$, $\Delta j(-1/2) = -\Delta j(1/2) = d_{av}/2$. La solución de este sistema debe introducirse en la ec. (5.32), lo que nos da la varianza de la distribución gaussiana, $\chi^2 \equiv d_{av}^2 \Lambda_\nu^2 / L\tau$. El momento canónico Δp_y se obtiene directamente de la integración de las ecs. (5.80c) y (5.80d),

$$\Delta p_y = K \sinh\left(x\sqrt{\frac{\nu}{\hat{D}}}\right), \quad (5.81)$$

que es una función impar de x como consecuencia de la paridad de y (o de Δy). La constante K se determina utilizando las condiciones de contorno, cosa que solo podemos hacer tras resolver las ecs. (5.80a) y (5.80b), habiendo insertado

previamente en ellas la ec. (5.81). Sustituyendo la ec. (5.81) en la ec. (5.32) tenemos

$$\Lambda_\nu^2 = K^2 \left(\int_{-1/2}^{1/2} dx Q(y_{av}) \sinh^2 \left(x \sqrt{\frac{\nu}{\hat{D}}} \right) \right)^{-1}. \quad (5.82)$$

Para evaluar la integral, tenemos que usar la ec. (5.77) para $Q(y)$, $Q(y) \propto y^\gamma$, siendo γ un parámetro función de β , $1 < \gamma \leq 2$. Ahora analizaremos el caso más simple, la versión disipativa del modelo KMP introducida en [45], que corresponde a $\beta = 0$ o $\gamma = 2$. En este caso, los calculos son más sencillos y tenemos

$$\Lambda_\nu^2 = \frac{\sinh(2\sqrt{2\nu}) - 2\sqrt{2\nu}}{4\sqrt{2\nu} \sinh^2(\sqrt{2\nu})}. \quad (5.83)$$

Es interesante ver que $\Lambda_\nu^2 \sim 1/3$, independiente de ν , en el límite de sistemas débilmente disipativos $\nu \ll 1$. Esto se puede entender como una reminiscencia del escalamiento de $G(d)$ deducido en la sección 5.2.2. De hecho, la ec. (5.60) nos dice que $G(d)$ es función sólo de d/d_{av} para $\gamma = 2$. En la aproximación gaussiana, esto implica la convergencia de Λ_ν^2 hacia un valor constante cuando $\nu \rightarrow 0^+$. Por otro lado, $\Lambda_\nu^2 \sim (2\sqrt{2\nu})^{-1}$ para $\nu \gg 1$, lo que es consistente con la supresión de las fluctuaciones de la disipación que encontramos anteriormente en el régimen de sistemas fuertemente disipativos, como expresa el escalamiento de la LDF de la ec. (5.74). El mismo comportamiento cualitativo se producirá para otros valores de β .

Hemos comprobado estas predicciones en simulaciones Monte Carlo estándar del modelo KMP disipativo descrito en el capítulo 1, para el caso particular de $\beta = 0$. La figura 5.2 muestra la función de densidad de probabilidad (pdf) para la energía disipada, integrada sobre todo el sistema y sobre un tiempo τ , para diferentes valores del coeficiente de disipación macroscópica $\nu \in [10^{-3}, 10^3]$. Para minimizar los efectos de tamaño finito en las medidas, hemos incrementado el tamaño del sistema con ν en las simulaciones, $L \propto \ell_\nu^{-1}$, de tal forma que el número de posiciones de la red por unidad de longitud es constante y suficientemente grande para que sea válido el régimen hidrodinámico. Además, el tiempo de integración $\tau = \mathcal{O}(1)$ para el límite continuo, difusivo, que es la escala de tiempo sobre la cual las predicciones hidrodinámicas deben ser correctas. La simulaciones de tipo Monte Carlo estándar no permiten obtener la cola de la distribución, pero son útiles para obtener el comportamiento de las fluctuaciones típicas en las que estamos interesados aquí (en torno a 5 desviaciones estándar alrededor del promedio). La

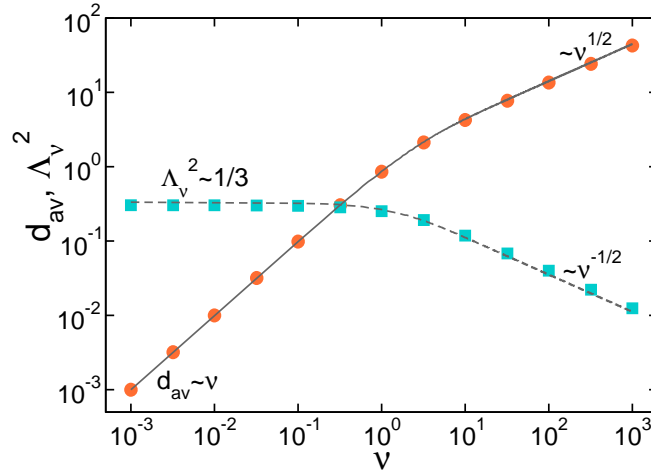


FIGURA 5.3: Disipación promedio y varianza medidas en las simulaciones, como función de ν para $\beta = 0$. La línea continua representa la predicción teórica para d_{av} , ec. (5.79), mientras que la discontinua es la estimación gaussiana para el parámetro de la varianza de la disipación, Λ_ν^2 , véase la ec. (5.83). El acuerdo es excelente en todos los casos. Nótese en particular el escalamiento con ν de ambos observables en los límites $\nu \ll 1$ y $\nu \gg 1$.

figura 5.2 nos muestra que, cuando representamos la pdf frente a la variable reducida $z \equiv (d - d_{av})/\chi$, la distribución de probabilidad $P_\tau(z)$ tiene el comportamiento aproximado de la distribución normal para las fluctuaciones típicas. Además, todas las curvas para los distintos ν colapsan en este régimen. Sin embargo, incluso en estas simulaciones estándar, se ve que las colas de la distribución (correspondientes a unas fluctuaciones moderadas de la disipación) son asimétricas y se desvían del comportamiento gaussiano. Esto se observa claramente en el recuadro de la figura 5.2. De hecho, el análisis de la LDF en la siguiente subsección muestra que la estadística de las fluctuaciones grandes es muy distinto de una distribución de Gauss.

Para comprobar nuestra teoría, también hemos comparado en la fig. 5.3 la disipación promedio medida y su varianza con los resultados analíticos. Representamos d_{av} y Λ_ν^2 como función del coeficiente de disipación macroscópica ν , variando en un rango que cubre 6 órdenes de magnitud, y el acuerdo teoría-simulación es excelente en todos los casos. En particular, la disipación promedio crece con ν (resp. con $\nu^{1/2}$) en el límite $\nu \ll 1$ (resp. $\nu \gg 1$), mientras la varianza permanece constante para $\nu \ll 1$ pero decrece como $\nu^{-1/2}$ para $\nu \gg 1$. La aproximación gaussiana para la varianza proporciona una estimación excelente de la varianza de la pdf de la disipación integrada. Para $L\tau \gg 1$, sus fluctuaciones son muy poco probables y la mayoría de la probabilidad se concentra en una región con una anchura proporcional a $(L\tau)^{-1/2}$ alrededor del promedio, un régimen descrito por la aproximación

gaussiana.

5.3.2. Espectro completo de las fluctuaciones de la disipación integrada

Ahora investigamos el espectro completo de las fluctuaciones (tanto típicas como raras) de la disipación integrada. Por tanto, necesitamos evaluar la LDF $G(d)$ para valores arbitrarios de d , que en general no tienen por qué ser cercanos al promedio d_{av} , tanto analítica como numéricamente. Como hemos visto, no es una tarea sencilla explorar con simulaciones de Monte Carlo estándar las colas de las distribuciones de probabilidad de la disipación, que según la LDF corresponden a eventos raros, exponencialmente improbables, véase la ec. (5.12). Esto se observa también en la fig. 5.2, donde la distribución de la disipación integrada se ha medido directamente, pero somos incapaces de obtener suficiente estadística en las colas de la pdf para analizar con claridad los resultados en el régimen no gaussiano. Una serie de trabajos recientes han solucionado este problema, diseñando un método eficiente para medir directamente las LDF en una clase amplia de sistemas de muchas partículas [38, 39, 56]. El método está basado en una modificación adecuada de la dinámica que depende de la magnitud de interés y que consigue que estos eventos “raros” no lo sean tanto [38] (véase el apéndice F). Ha sido desarrollado tanto para dinámica markoviana en tiempo discreto [38] como para tiempo continuo [39]. Este método proporciona la transformada de Legendre-Fenchel de la LDF de la disipación, que se define como $\mu(s) = \max_d[G(d) + sd]$. [9] En particular, si $U_{C'C}$ es la probabilidad de transición de la configuración C a C' del proceso estocástico asociado, la dinámica modificada se define como $\tilde{U}_{C'C}(s) = U_{C'C} \exp(s d_{C'C})$, donde $d_{C'C}$ es la energía disipada en la transición elemental $C \rightarrow C'$. Se puede demostrar [28, 29, 38, 39, 56] que el logaritmo del autovalor más grande de la matriz $\tilde{U}(s)$ nos da $\mu(s)$, y mediante la inversión de esta transformada de Legendre se obtiene el valor numérico de $G(d)$. En concreto, la transformada de Legendre $\mu(s)$ se mide evolucionando un número grande de copias o “clones” del sistema usando la dinámica modificada $\tilde{U}(s)$ refs. [38, 39, 56]. Este método es exacto en el límite $M \rightarrow \infty$, pero en la práctica sólo somos capaces de simular un número grande de la población de clones, típicamente $M \in [10^3, 10^4]$. Esto introduce efectos adicionales de tamaño finito relacionados con la población de clones, que deben ser considerados con cuidado, véase [34] para una discusión más profunda al respecto. Los resultados numéricos de la LDF de las secciones siguientes se han obtenido usando esta técnica avanzada de Monte Carlo.

5.3.2.1. Sistemas débilmente disipativos $\nu \ll 1$

Ahora centraremos nuestra atención en el análisis de la LDF de la disipación integrada para $\nu \ll 1$. En el caso general desarrollado en la sección 5.2, encontramos la propiedad de escalamiento para $G(d)$ dada por la ec. (5.60),

$$\left(\frac{d_{\text{av}}}{\nu}\right)^{\gamma-2} G(d) = - \left[1 - \frac{d/d_{\text{av}}}{Y_0(\tilde{\mathcal{H}})}\right] \tilde{\mathcal{H}}, \quad (5.84)$$

donde $\gamma = (2+\beta)/(1+\beta)$, $Y_0(\tilde{\mathcal{H}})$ está determinado por la ec. (5.55), y la constante $\tilde{\mathcal{H}}$ depende sólo del cociente d/d_{av} , como nos dice la ec. (5.57).

Para una mayor sencillez, vamos a considerar el caso “lineal” $\beta = 0$, que corresponde al modelo KMP disipativo introducido en la ref. [45]. La ecuación (5.52) para el perfil de densidad queda ahora

$$Y'(x)^2 = 8\tilde{\mathcal{H}}Y^2 \left(1 - \frac{Y}{Y_0}\right), \quad Y(\pm 1/2) = 1, \quad (5.85)$$

que puede ser integrada explícitamente, con la solución

$$Y(x, \tilde{\mathcal{H}}) = Y_0 \text{sech}^2(x\sqrt{2\tilde{\mathcal{H}}}), \quad Y_0 = \cosh^2 \sqrt{\frac{\tilde{\mathcal{H}}}{2}}, \quad (5.86)$$

donde hemos usado también que $Y(x)$ tiene que ser una función par de x . El perfil reescalado de la corriente $\Psi(x)$ introducido en la ec. (5.53) es

$$\Psi(x, \tilde{\mathcal{H}}) = -\frac{\cosh^2 \sqrt{\frac{\tilde{\mathcal{H}}}{2}}}{\sqrt{2\tilde{\mathcal{H}}}} \tanh(x\sqrt{2\tilde{\mathcal{H}}}). \quad (5.87)$$

Los perfiles óptimos para la densidad y la corriente pueden escribirse ahora fácilmente combinando las dos ecuaciones anteriores con las ecs. (5.61)-(5.62), obteniéndose

$$\rho(x) = TY(x) = T \cosh^2 \sqrt{\frac{\tilde{\mathcal{H}}}{2}} \text{sech}^2(x\sqrt{2\tilde{\mathcal{H}}}), \quad (5.88a)$$

$$j(x) = d_{\text{av}}\Psi(x) = -d_{\text{av}} \frac{\cosh^2 \sqrt{\frac{\tilde{\mathcal{H}}}{2}}}{\sqrt{2\tilde{\mathcal{H}}}} \tanh(x\sqrt{2\tilde{\mathcal{H}}}) \quad (5.88b)$$

en función de $\tilde{\mathcal{H}} = \tilde{\mathcal{H}}(d/d_{\text{av}})$. Aquí hemos tenido en cuenta que $y \equiv \rho$ para $\beta = 0$. Nótese que las curvas $\rho(x)/T = Y(x, \tilde{\mathcal{H}})$ para distintos valores de ν representados como función de x sólo dependen de la disipación relativa d/d_{av} . La ec. (5.57)

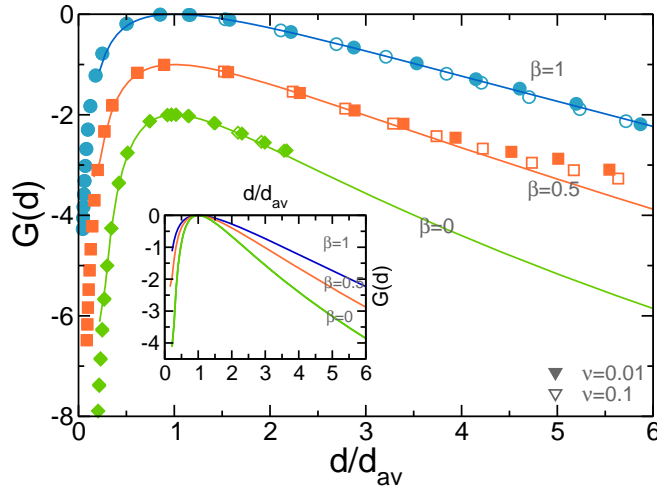


FIGURA 5.4: Escalamiento de la LDF en el límite $\nu \ll 1$ para $N = 50$, $T = 1$, $\beta = 0, 0.5, 1$ y dos valores diferentes de ν , $\nu = 0,01$ (símbolos rellenos) y $\nu = 0,1$ (símbolos huecos). Las líneas continuas son las predicciones de la MFT. Las curvas se han desplazado verticalmente por conveniencia, $G(d_{av}) = 0, \forall \nu, \beta$. Para el caso de $\beta = 0$, las curvas de las simulación se han representado para $d < d_I$, con d_I el punto de inflexión en el cual $G(d)$ cambia su convexidad (véase también la Fig. 5.5). Recuadro: Comparación de la $G(d)$ teórica de los distintos β , donde puede verse claramente que un aumento de β favorece las fluctuaciones grandes de la disipación.

implica que

$$\frac{d}{d_{av}} = 2\Psi(-1/2) = \frac{\sinh \sqrt{2\tilde{\mathcal{H}}}}{\sqrt{2\tilde{\mathcal{H}}}}, \quad d_{av} \sim \nu T, \quad (5.89)$$

que nos da la constante $\tilde{\mathcal{H}}$ implícitamente en términos de d/d_{av} . Finalmente, particularizando la ec. (5.84) para el caso de $\gamma = 2$ que estamos analizando (recuérdese que $\beta = 0$), obtenemos

$$G(d) = \sqrt{2\tilde{\mathcal{H}}} \tanh \sqrt{\frac{\tilde{\mathcal{H}}}{2}} - \tilde{\mathcal{H}}. \quad (5.90)$$

La ecuación (5.89) para $\tilde{\mathcal{H}}(d/d_{av})$ requiere de un análisis cuidadoso. Del caso general discutido en la sec. 5.2.2, tenemos que $\tilde{\mathcal{H}} > 0$ para $d > d_{av}$, y por tanto $\sqrt{2\tilde{\mathcal{H}}}$ es un número real, mientras que $\tilde{\mathcal{H}} > 0$ para $d < d_{av}$ y $\sqrt{2\tilde{\mathcal{H}}}$ es imaginario. Esto último no causa ningún problema para $G(d)$, que siempre es real. De hecho, si escribimos $\sqrt{\tilde{\mathcal{H}}} = i\sqrt{|\tilde{\mathcal{H}}|}$, llegamos a $G(d) = -\sqrt{2|\tilde{\mathcal{H}}|} \tan \sqrt{\frac{|\tilde{\mathcal{H}}|}{2}} + |\tilde{\mathcal{H}}|$ para $\tilde{\mathcal{H}} < 0$. En el límite de $d \rightarrow 0^+$, tenemos que $\tilde{\mathcal{H}} \rightarrow -\pi^2/2$, y de esta forma obtenemos $G(d) \rightarrow -\infty$, como se prevé desde un punto de vista físico.

La ecuación (5.90) da una forma de escalamiento sencilla para $G(d)$, independiente de ν , para el caso lineal $\beta = 0$ (el modelo KMP disipativo) en el límite $\nu \ll 1$ [45]. Como anticipamos en (5.84), la curva de $G(d)$ respecto de la disipación relativa

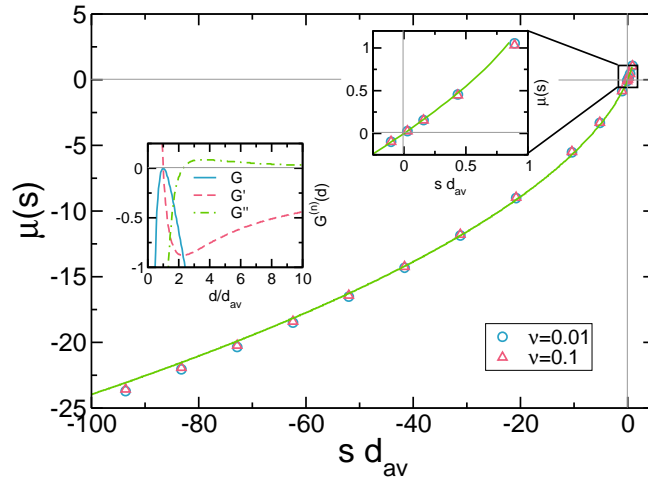


FIGURA 5.5: Gráfico escalado de la transformada de Legendre de la LDF de la disipación, $\mu(s) = \max_d[G(d)+sd]$, en el límite $\nu \ll 1$ para $N = 50$, $T = 1$, $\beta = 0$ y dos valores distintos de ν , $\nu = 0,01$ (círculos) y $\nu = 0,1$ (triángulos). La línea continua es la predicción de la MTF, ec. (5.95). Nótese que $\mu(s)$ está definido hasta el valor umbral $s_I = 0,878458/d_{av}$, más allá del cual la transformada de Legendre-Fenchel diverge. El recuadro de arriba-derecha muestra un zoom alrededor de dicho umbral s_I , que está relacionado con el punto de inflexión de $G(d)$ en $d_I = 2,27672d_{av}$. En el recuadro del centro-izquierda se ve que $G''(d_I) = 0$, para $d > d_I$ la LDF de la disipación no es convexa.

d/d_{av} es independiente de ν en este régimen cuasielástico. Este escalamiento se confirma totalmente en la fig. 5.4, en la cual representamos $G(d)$ para distintos, valores pequeños de $\nu \in [10^{-2}, 10^{-1}]$, medidos en las simulaciones del modelo KMP disipativo usando las técnicas avanzadas de tipo Monte Carlo descritas al principio de esta subsección. En particular, el acuerdo entre teoría y simulación es excelente en todo el rango de fluctuaciones que podemos estudiar. La LDF está fuertemente sesgada con un decrecimiento rápido para las fluctuaciones con $d < d_{av}$ y no tiene rama negativa. Así, los teoremas de fluctuación que relacionan las probabilidades de la disipación integrada dada d y de su evento inverso $-d$ no son válidos para este caso [32, 42]. Por supuesto este resultado es algo esperado, dado que la reversibilidad de la dinámica microscópica es una condición necesaria para que el teorema sea aplicable [57]. El límite $\tilde{\mathcal{H}} \gg 1$ corresponde a las fluctuaciones grandes de la disipación, donde $G(d) \approx -\frac{1}{2}[\ln(d/d_{av})]^2$, esto es, un decrecimiento logarítmico muy lento, lo que muestra que las fluctuaciones grandes son mucho más probables que las predichas por la estadística gaussiana ($\sim -\frac{3}{2}(d/d_{av})^2$). De hecho, ese decaimiento lento implica la presencia de un punto de inflexión en $G(d)$: hay un valor d_I tal que $G''(d_I) = 0$. La convexidad de $G(d)$ cambia en $d = d_I$, $G''(d) < 0$ para $d < d_I$ mientras que $G''(d) > 0$ para $d > d_I$. Concretamente, las ecs. (5.89) y (5.90) implican que $d_I/d_{av} = 2,27672$, véase el recuadro en el centro-izquierda de la fig. 5.5. No es posible, con el estado actual del conocimiento, medir LDF no convexas mediante técnicas avanzadas de Monte Carlo. La razón es que, como

describimos al principio de esta sección, este método de Monte Carlo avanzado se basa en la medida de la transformada de Legendre-Fenchel de la LDF de interés, que no está bien definida cuando la LDF no es convexa [9]. Para comprender mejor este punto, recordemos que la transformada de la LDF de la disipación se puede escribir como

$$\mu(s) = \underset{d}{\text{máx}}[G(d) + sd] = G[d^*(s)] + s d^*(s), \quad (5.91)$$

donde $d^*(s)$ es solución de la ecuación

$$\frac{\partial G(d)}{\partial d} = -s. \quad (5.92)$$

Nótese que, matemáticamente, $\mu(s)$ es la transformada de Legendre-Fenchel de $-G(d)$, que es la función convexa³. La derivada parcial de $G(d)$ con respecto a d está relacionada con la integral primera de las ecuaciones de Hamilton Π_{ψ_0} , véase la ec. (5.42), que a su vez puede obtenerse de las ecs. (5.63) y (5.86), con el resultado

$$\Pi_{\psi_0} = \nu \frac{\partial G}{\partial d} = -\frac{\tilde{\mathcal{H}}}{T} \text{sech}^2 \sqrt{\frac{\tilde{\mathcal{H}}}{2}}. \quad (5.93)$$

De forma equivalente,

$$s = -\frac{\partial G}{\partial d} = \frac{\tilde{\mathcal{H}}}{\nu T} \text{sech}^2 \sqrt{\frac{\tilde{\mathcal{H}}}{2}}. \quad (5.94)$$

Haciendo uso ahora de las ecs. (5.89), (5.90) y (5.94), la transformada de Legendre de la LDF de la disipación se puede escribir como

$$\mu(s) = 2\sqrt{2\tilde{H}} \tanh \sqrt{\frac{\tilde{H}}{2}} - \tilde{\mathcal{H}}, \quad (5.95)$$

en función de $\tilde{\mathcal{H}} = \tilde{\mathcal{H}}(s)$, como viene dado por la ec. (5.94). Nótese que el escalamiento de $G(d)$ con d/d_{av} , véase la ec. (5.84), implica un colapso similar para $\mu(s)$ cuando lo representamos como una función de $s d_{\text{av}}$. La ec (5.92) tiene una sola solución $d^*(s)$ para $s < 0$ y no plantea ningún problema. Por otro lado, debido a la existencia de un punto de inflexión, $G'(d)$ exhibe un mínimo en d_I , incrementándose suavemente después para tender asintóticamente a cero en el límite $d \rightarrow \infty$, véase el recuadro en el centro izquierda de la fig. 5.5. Entonces, para $s > 0$ existen dos soluciones $d_1^*(s) \leq d_I \leq d_2^*(s)$ para la ec. (5.92), pero sólo la primera maximiza la ec. (5.91). Esto significa que no podemos obtener $G(d)$ invirtiendo

³Aunque hay cierta ambigüedad en la bibliografía al definir convexidad/concavidad, el criterio más extendido en matemáticas es llamar convexa a aquellas funciones con derivada segunda positiva.

la transformada de Legendre de $\mu(s)$ para disipaciones por encima del punto de inflexión $d_I = 2,27672 d_{av}$. De hecho, $\mu(s)$ está definida hasta un s_I crítico, tal que $s_I = 0,87845/d_{av}$ (la pendiente de $-G(d)$ en el punto de inflexión), más allá del cual $\mu(s)$ diverge. Esto se puede ver atendiendo a las propiedades principales de $\mu(s)$, esto es

$$\frac{\partial \mu}{\partial s} = d, \quad \frac{\partial^2 \mu}{\partial s^2} = - \left[\frac{\partial^2 G}{\partial d^2} \right]^{-1}. \quad (5.96)$$

Por tanto, μ tiene una singularidad en el valor correspondiente al punto de inflexión d_I , donde $\partial^2 \mu / \partial s^2$ diverge. La transición al comportamiento no convexo implica que sólo podemos medir la estadística de las fluctuaciones raras de la disipación hasta d_I usando el algoritmo avanzado de clones [38, 39, 56]. La fig. 5.5 muestra una comparación entre la transformada de Legendre $\mu(s)$, medida para dos valores diferentes de $\nu \ll 1$ y los valores teóricos, hasta el valor crítico s_I . El acuerdo es excelente en todos los casos, confirmando el colapso de $\mu(s)$ cuando se representa frente a $s d_{av}$.

Podríamos resolver de la misma forma la MFT para la disipación integrada para valores arbitrarios de los exponentes β , pero las expresiones matemáticas son más complicadas que para el caso ilustrativo que hemos tratado aquí. La figura 5.4 muestra también la LDF de la disipación para otros exponentes $\beta > 0$, así como los resultados de los experimentos numéricos en estos casos. Cualitativamente, los resultados son similares, siendo independientes de ν las LDF escaladas en el límite $\nu \ll 1$, que tienden rápidamente a cero cuando $d \rightarrow 0^+$ y tienen una cola que decae lentamente para $d \gg d_{av}$. A partir de los resultados numéricos, esta cola “pesada” cambia su convexidad para una disipación integrada grande d_I que crece con (a) ν para un β fijado (b) β para un ν fijado. Para $\beta = 0$, tenemos $d_I/d_{av} \simeq 2,8$ con $\nu = 1$, mientras que $d_I/d_{av} > 6$ para $\nu = 10$. Por otro lado, para $\beta = 1$ se tiene que $G''(d) < 0$ en la región considerada. Para $\beta = 0,5$, los valores positivos de $G''(d)$ son tan pequeños que hemos escogido no eliminar los puntos más allá del valor numérico del punto de inflexión, $d_I/d_{av} \simeq 3,2$ para $\nu \ll 1$ y $d_I/d_{av} \simeq 5,1$ para $\nu = 1$, aunque coinciden aproximadamente con los valores en los cuales la predicción teórica y las curvas de simulación empiezan a separarse. La comparación con los resultados numéricos es excelente en todos los casos. En el recuadro en la fig. 5.4, presentamos los resultados teóricos para la LDF $G(d)$ para los tres valores de β considerados. Se observa que las fluctuaciones grandes de la disipación se hacen más probables al aumentar β .

También hemos medido los perfiles típicos de energía asociados con una fluctuación de la disipación dada para el caso $\beta = 0$, véase la fig. 5.6, encontrándose

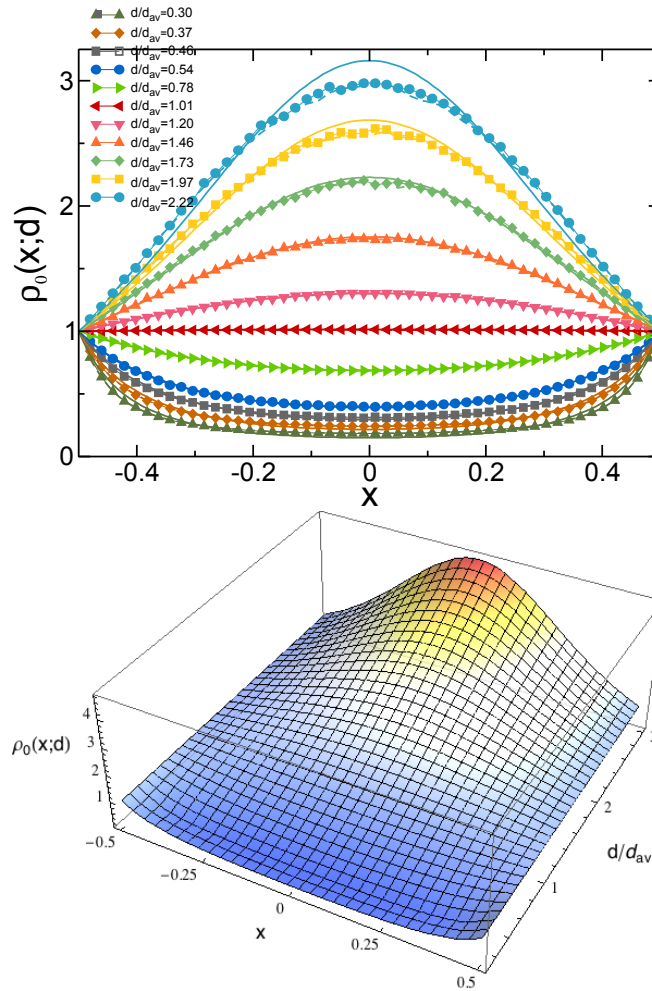


FIGURA 5.6: Arriba: Perfiles de energía óptimos al variar d/d_{av} , medidos para $\nu = 10^{-3}$ (símbolos) y $\nu = 10^{-2}$ (líneas discontinuas), y las predicciones de la MFT (líneas continuas). Todas las curvas corresponden al caso lineal $\beta = 0$. El acuerdo entre teoría y simulación es excelente en todos los casos. Abajo: Predicciones de la MFT para los perfiles óptimos de energía, variando d/d_{av} .

un acuerdo muy bueno con la MFT desarrollada en esta tesis. Notablemente, los perfiles óptimos para diferentes $\nu \ll 1$ también colapsan para un d/d_{av} constante (todas las simulaciones las hemos realizado para el mismo valor de la temperatura en los contornos de $T = 1$), como predice la ec. (5.88a). Los perfiles exhiben la simetría $x \leftrightarrow -x$ conjeturada para simplificar el problema variacional. Además, presentan un único extremo que puede ser mínimo o máximo dependiendo del valor de la disipación relativa d/d_{av} , una propiedad que dedujimos del formalismo general en la sección 5.2.2. Los perfiles asociados a las fluctuaciones de la disipación por encima del promedio muestran una sobreinyección de energía en el seno del sistema. Esta observación sugiere que el mecanismo responsable de una disipación integrada grande consiste en una sobreinyección de energía desde el baño térmico, que se transporta hasta el seno del sistema donde es disipada. La misma observación cualitativa, y un buen acuerdo entre teoría y simulación, es válida

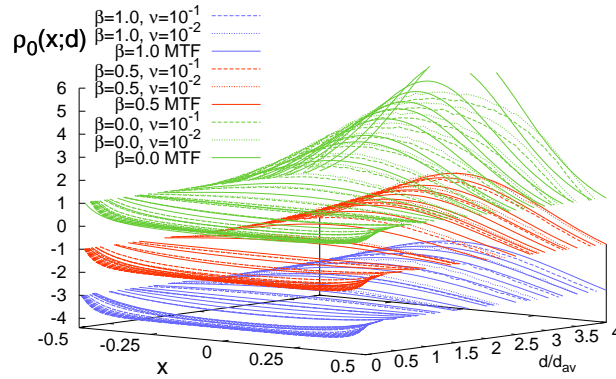


FIGURA 5.7: Colapso de los perfiles óptimos de la energía medidos para $N = 50$ y $T = 1$, como función de la disipación relativa d/d_{av} , para diferentes valores de $\nu \ll 1$. Concretamente, hemos representado los perfiles correspondientes a $\nu = 10^{-2}$ (líneas punteadas) y $\nu = 10^{-1}$ (líneas discontinuas), para $\beta = 0$ (arriba, verde), $\beta = 0,5$ (en medio, rojo) y $\beta = 1$ (abajo, azul). Todas las curvas están desplazadas verticalmente para facilitar su visualización, $\rho = 1$ en los extremos siempre. Para un valor dado de la disipación integrada relativa d/d_{av} , la sobre inyección central es menos pronunciada cuanto más grande es β . Las líneas continuas son las predicciones de la MFT.

también para otros valores distintos del exponente $\beta > 0$, véase la fig. 5.7. Nótese el colapso que ocurre para distintos valores de $\nu \ll 1$ pero la misma disipación relativa. Es interesante señalar que los perfiles óptimos son menos pronunciados conforme aumenta la no linealidad, esto es, el exponente β , véase la fig. 5.7. Esto da una interpretación física de la variación de la anchura de $G(d)$ con β observada en la fig. 5.4: para el mismo valor de d/d_{av} y un β mayor, el perfil óptimo asociado está más cerca de la solución hidrodinámica promedio, y de ahí que sus fluctuaciones decrezcan menos y tengan una probabilidad asociada mayor.

5.3.2.2. Sistemas con coeficiente de disipación arbitraria ν

En principio, para valores arbitrarios de $\nu \gtrsim 1$, no se puede deducir un escalamiento general para la LDF $G(d)$. Para cada caso particular, tenemos que resolver el problema variacional completo, que en general es intratable analíticamente. Para seguir avanzando, nos apoyamos en la evaluación numérica de los perfiles óptimos, que después usamos para calcular la LDF. La fig. 5.8 muestra las predicciones teóricas de $G(d)$ para valores crecientes de ν y distintos valores de β , junto con los resultados numéricos de las simulaciones. Al igual que para el límite de sistemas débilmente disipativos, el acuerdo entre teoría y simulación en la figura 5.8 es muy bueno. Atribuimos las diferencias observadas entre la teoría y la simulación a efectos de tamaño finito, que se hacen más apreciables al aumentar ν , compárese con

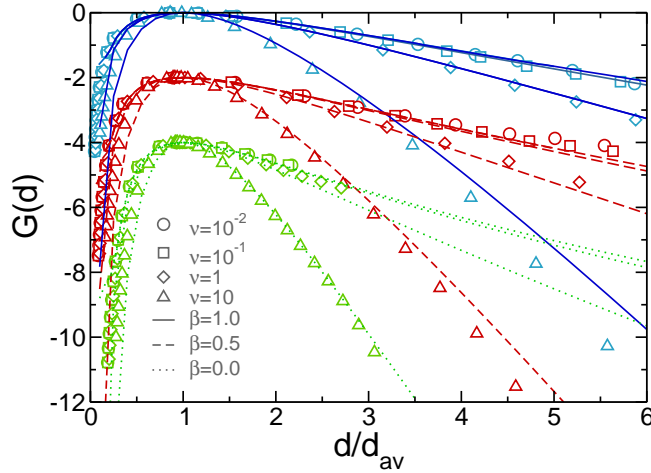


FIGURA 5.8: La LDF de la disipación para $N = 50$, $T = 1$, $\beta = 0, 0,5, 1,0$ y $\nu \in [10^{-2}, 10]$. Las curvas para $\beta = 0,5$ y 0 se han desplazado verticalmente por conveniencia (recuérdese que $G(d_{av}) = 0 \forall \nu, \beta$); los valores $\beta = 1, 0,5$ y 0 se corresponden con las curvas de arriba (azul), centro (rojo) y abajo (verde). Las predicciones de la MFT se representan con líneas continuas para $\beta = 1$, discontinuas para $\beta = 0,5$, y punteadas para $\beta = 0$. Igual que en la fig. 5.4, para un ν fijado, aumentar β facilita las fluctuaciones grandes de la disipación.

la fig. 5.4 (véase también [51]). Estos efectos grandes de tamaño finito son previsible, dada la escala natural de longitud asociada con un ν dado, $\ell_\nu = \sqrt{\hat{D}/\nu}$, que decrece con ν . Así, es necesario considerar sistemas más grandes para mantener la convergencia al límite macroscópico. Además, los efectos de tamaño finito relacionados con el número de clones M , usados para desarrollar el método de simulación, se vuelven un problema en este límite [24, 34].

En cualquier caso, la forma de las curvas de $G(d)$ cuando incrementamos ν para un valor de β dado muestran una supresión fuerte de las fluctuaciones grandes de la disipación para $\nu \gg 1$, como argumentamos en general en la sección 5.2.2. En este límite fuertemente disipativo, la longitud característica $\ell_\nu \rightarrow 0$, y el sistema se desacopla en dos mitades independientes. De esta forma, la energía se concentra en dos capas límite de anchura ℓ_ν en las cercanías de los baños térmicos, una imagen está de nuevo de acuerdo con los resultados generales de la sec. 5.2.2. Este comportamiento se refleja en los perfiles óptimos de energía medidos para una d dada cuando $\nu = 10$, véase la fig. 5.9. Obsérvese el contraste con el comportamiento para $\nu \ll 1$, que mostramos en las figs. 5.6-5.7. El acuerdo de los perfiles numéricos con la predicción teórica de la MFT es muy bueno, más teniendo en cuenta los efectos de tamaño finito que acabamos de discutir. La fig. 5.9 (inferior) muestra los perfiles de densidad de energía medidos para distintos valores del exponente β , como una función de la disipación relativa d/d_{av} . A partir de esta figura, es claro que, para una disipación relativa dada, la localización de la energía alrededor de

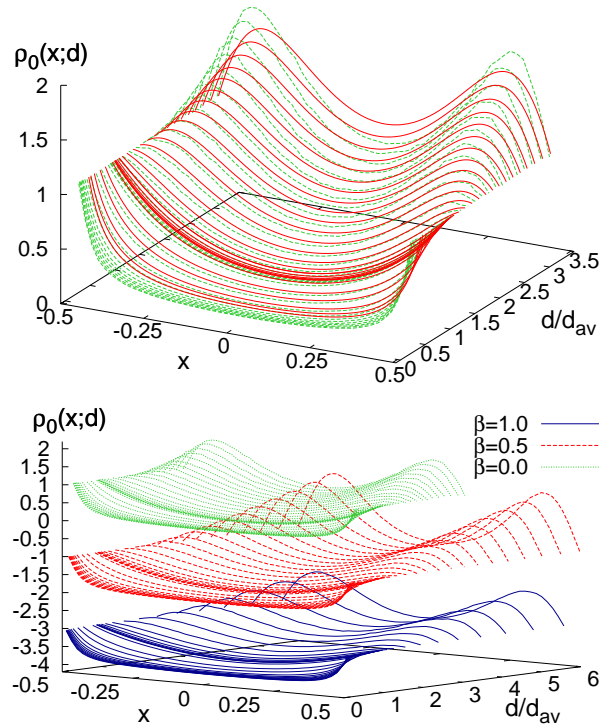


FIGURA 5.9: Arriba: Perfiles óptimos de la energía como función de la disipación relativa medida para $\nu = 10$, $N = 50$ and $T = 1$, en el caso particular $\beta = 0$. La líneas discontinuas verdes corresponden a la simulación mientras que las líneas continuas son las predicciones de la MFT. Abajo: Perfiles óptimos de la energía para $\nu = 10$, $N = 50$ y $T = 1$, al variar el exponente β , $\beta = 0$ (línea de puntos verde), $\beta = 0,5$ (línea discontinua roja), y $\beta = 1$ (línea continua azul). La curvas se han desplazado verticalmente por conveniencia, $\rho = 1$ siempre en los contornos. Para una disipación integrada d dada, la concentración de la energía cerca de los contornos disminuye al crecer β .

los baños térmicos decrece cuando β crece. Esto sugiere de nuevo que, al igual que en el límite $\nu \ll 1$, la probabilidad de una fluctuación de una disipación relativa d/d_{av} fijada crece con β , dando lugar a la mayor anchura de $G(d)$ al crecer β que se observa en la fig. 5.8.

Capítulo 6

Conclusiones

En esta tesis, hemos estudiado en detalle la hidrodinámica fluctuante y las fluctuaciones, tanto típicas como raras, de la energía disipada en una clase general de modelos de red difusivos (i) caracterizados por la presencia de disipación en su seno (ii) forzados a través de sus contornos. La dinámica es estocástica: parejas de sitios próximos vecinos colisionan con una frecuencia que es una cierta función de la energía del par. Una parte dada de la energía del par se disipa al medio circundante, mientras que el resto se redistribuye aleatoriamente dentro del par. Además, los sitios de los contornos pueden estar acoplados a baños térmicos que inyectan energía en el sistema, de modo que el sistema alcanza un estado estacionario de no equilibrio en el límite de tiempos grandes. Esta clase de modelos disipativos forzados es una generalización del modelo KMP de conducción del calor al caso no lineal y disipativo, y pueden considerarse como una manera extremadamente sencilla de modelar ciertos aspectos de los sistemas disipativos reales, tales como los fluidos granulares. De hecho, y de modo interesante, sus descripciones hidrodinámicas fluctuantes presentan analogías llamativas, como hemos visto a lo largo de esta tesis.

A continuación, enumeramos las principales conclusiones de nuestro trabajo:

1. En el límite de tamaño del sistema grande, hemos mostrado que la densidad de energía $\rho(x, t)$ obedece una ecuación de balance fluctuante, que contiene dos campos adicionales fluctuantes de corriente y disipación, $j(x, t)$ y $d(x, t)$, respectivamente. El campo de corriente promedio obedece localmente una ley de Fourier no lineal, con un coeficiente de difusión que depende de la densidad, mientras que la disipación promedio es una cierta función de la densidad local.

2. El ruido de la corriente es blanco y gaussiano, mientras que el ruido de la disipación es subdominante debido a la cuasielasticidad de la dinámica “microscópica”. Esta cuasielasticidad de la dinámica microscópica asegura una competición no trivial entre la difusión y la disipación de energía, que actúan sobre la misma escala de tiempo.
3. Asimismo, hemos obtenido expresiones explícitas para los coeficientes de transporte, usando una aproximación de tipo equilibrio local, cuya validez hemos comprobado a posteriori. De modo interesante, la amplitud de las fluctuaciones de la corriente (la movilidad) $\sigma(\rho)$ está relacionada con la difusividad $D(\rho)$ por una relación de fluctuación-disipación, $\sigma(\rho) = 2\rho^2 D(\rho)$, a pesar de que estamos estudiando un sistema que se encuentra intrínsecamente fuera del equilibrio. Además, el nuevo coeficiente de transporte asociado a la disipación, $R(\rho)$, no es independiente del coeficiente de difusión, sino que está relacionado con el mismo por una ecuación diferencial de primer orden.
4. Hemos particularizado los resultados obtenidos para una elección concreta del ritmo de colisión, cuando éste depende algebraicamente de la energía del par. Esta elección es interesante porque (i) este tipo de dependencia algebraica aparece en muchos sistemas físicos reales, por ejemplo en un fluido de esferas duras el ritmo de colisión es proporcional a la raíz cuadrada de la densidad de energía local, y (ii) con esta elección podemos obtener expresiones explícitas para los coeficientes de transporte.
5. Hemos comprobado las predicciones de la hidrodinámica fluctuante, comparándolas con simulaciones de Monte Carlo de la familia de modelos propuesta. Se encuentra un acuerdo excelente, incluso para sistemas de tamaño no tan grande, $L \gtrsim 10$, lo que apoya la validez de la teoría hidrodinámica fluctuante presentada. Dada la generalidad de la familia de modelos propuesta, esperamos que la misma situación se encuentre para cualquier elección no patológica de la función que determina el ritmo de colisión.
6. A continuación, hemos desarrollado un marco teórico general para calcular la probabilidad de las grandes desviaciones de la energía disipada a partir de la hidrodinámica fluctuante elaborada en la primera parte de la tesis. El punto de partida es la ecuación de evolución hidrodinámica fluctuante para la densidad, que incluye un término de corriente y un término de sumidero. En una primera parte, no necesitamos que esta hidrodinámica fluctuante provenga de la clase general de modelos central de esta memoria, sino que la tomamos como punto de partida.

7. Comenzando con una formulación de integral de camino del problema, se puede escribir la probabilidad de una trayectoria en el “espacio de las fases” mesoscópico, esto es, el espacio generado por los campos hidrodinámicos lentos. Como consecuencia de la cuasielasticidad de la dinámica “microscópica”, la acción asociada con cada posible camino tiene exactamente la misma forma sencilla que se encuentra en otros sistemas difusivos sin disipación de energía.
8. Hemos usado este funcional de acción para investigar la función de grandes desviaciones de la energía disipada. Una hipótesis de *aditividad* simplifica el problema variacional, pudiendo obtenerse la ecuación de Euler-Lagrange que satisfacen los campos óptimos, de densidad de energía y corriente, que sostienen una fluctuación arbitraria. El problema variacional admite una reformulación hamiltoniana, que es adecuada para analizar la teoría general en ciertos límites de interés.
9. Hemos desarrollado una solución perturbativa del problema variacional que muestra que las fluctuaciones pequeñas alrededor del comportamiento promedio están distribuidas según una ley gaussiana, consistentemente con el teorema del límite central. Además, la varianza de esta distribución gaussiana concuerda muy bien con la obtenida en la simulación de Monte Carlo de la dinámica del modelo “microscópico”.
10. La función de grandes desviaciones presenta una separación clara del comportamiento gaussiano para las fluctuaciones grande de la disipación, con una distribución que no presenta rama negativa. Además, encontramos formas de escalamiento generales en los límites de sistemas débilmente y fuertemente disipativos, que pueden analizarse parcialmente sin conocer la solución explícita de las ecuaciones canónicas.
11. En una segunda parte de esta sección, hemos aplicado los resultados anteriores a la clase general de sistemas disipativos que hemos considerado en esta tesis. Las predicciones teóricas, que incluyen expresiones explícitas para la función de grandes desviaciones en ciertos casos, se han comparado con simulaciones de Monte Carlo de los modelos microscópicos. Hemos encontrado un acuerdo excelente en todos los casos, tanto para las fluctuaciones típicas como para las raras.
12. En particular, hemos confirmado el escalamiento simple de la función de grandes disipaciones en los sistemas débilmente disipativos para distintos

valores del exponente de no linealidad β . Esta función de grandes desviaciones muestra un comportamiento no convexo para fluctuaciones muy grandes. Además, los perfiles de densidad de energía tienen un máximo en el seno del sistema, que proviene de un exceso de inyección de energía desde los baños térmicos.

13. En el límite de sistemas fuertemente disipativos, la longitud de escala típica tiende a cero y el sistema se divide de modo efectivo en dos zonas prácticamente desacopladas. Esto da lugar a un escalamiento diferente para la función de grandes desviaciones, que predice una fuerte supresión de las fluctuaciones de la disipación en este régimen.
14. Resumiendo, nuestros resultados muestran que una generalización adecuada de la teoría de las fluctuaciones macroscópicas de Bertini y colaboradores permite describir en detalle el comportamiento fluctuante de una clase general de medios disipativos forzados no lineales. En este esquema, la función de grandes desviaciones se obtiene a partir de un problema variacional, cuya solución proporciona los perfiles óptimos que el sistema adopta para sostener la fluctuación considerada.
15. El marco teórico propuesto es muy general, ya que esta teoría de las fluctuaciones macroscópica se basa únicamente en el conocimiento de (a) las ecuaciones de balance para los campos fluctuantes y (b) los coeficientes de transporte que aparecen en estas ecuaciones de balance. Esto puede abrir la puerta a nuevos resultados generales en la mecánica estadística de no equilibrio de los medios disipativos.
16. En el futuro, algunos problemas que no han sido abordados en esta memoria merecerían la atención:
 - a) Sería interesante explorar la existencia de transiciones de fase y rupturas espontáneas de simetría a nivel fluctuante en esta clase general de sistemas disipativos, para ver si también está presente este fenómeno encontrado en sistemas conservativos.
 - b) Además, como las magnitudes relevantes para caracterizar el comportamiento de no equilibrio en estos sistemas disipativos son tanto la energía disipada como la corriente, sería interesante analizar las fluctuaciones conjuntas de estos dos observables dentro del enfoque general de la teoría de las fluctuaciones macroscópicas.

Parte II

Apéndices

Apéndice A

Propiedades de los cumulantes del ruido de la disipación

En la sección 4.1.3 hemos visto que el ruido de la disipación es blanco ec. (4.30) en el límite de tamaño del sistema grande $L \gg 1$, con su amplitud κ dada por la suma de la contribuciones en las ecs. (4.31a) y (4.31b). Definimos

$$\tilde{\eta} = L^{1/2}\eta, \quad (\text{A.1})$$

de modo que $\tilde{\eta}$ es el ruido de la disipación escalado con el tamaño del sistema, de modo análogo a lo que hicimos para la corriente. Con esta definición, tenemos

$$\langle \tilde{\eta}(x, t) \rangle = 0, \quad \langle \tilde{\eta}(x, t) \tilde{\eta}(x', t') \rangle = L^{-2} \nu^2 \kappa(\rho) \delta(x - x') \delta(t - t'). \quad (\text{A.2})$$

El cumulante de segundo orden del ruido escalado se anula cuando $L \rightarrow \infty$, como se ve claramente en la ec. (A.2). A continuación, vamos a demostrar que esto también es cierto para todos los cumulantes de orden superior cuando $L \rightarrow \infty$.

Consideremos un cumulante de orden n del ruido microscópico $\eta_{l,p}$, que es igual al momento de orden n -ésimo de η más una suma de términos no lineales en sus momentos de orden inferior. Sabemos que en la correlación $\langle \eta_{l,p} \eta_{l',p'} \rangle$ el comportamiento dominante es L^{-5} , como expresa la ec. (4.30)¹. Análogamente, el momento de orden n $\langle d_{l,p} d_{l',p'} \dots d_{l^{(n)},p^{(n)}} \rangle$ tiene un comportamiento dominante de orden L^{-1-2n} para todos los tiempos iguales $p = p' = \dots = p^{(n)}$, que proviene del factor

¹Esto proviene de que el término dominante, que aparece para $p = p'$, se comporta como $(1 - \alpha)^2/L$, y $1 - \alpha$ escala como L^{-2} , como hemos usado repetidamente a lo largo de esta memoria.

$(1 - \alpha)^n/L$. De esta forma,

$$\langle d_{l,p} d_{l',p'} \cdots d_{l^{(n)},p^{(n)}} \rangle \sim L^{-1-2n} \nu^n \tau_p \langle D_{lp} \rangle \delta_{l,l'} \delta_{l',l''} \cdots \delta_{l^{(n-1)},l^{(n)}} \delta_{p,p'} \delta_{p',p''} \cdots \delta_{p^{(n-1)},p^{(n)}}, \quad (\text{A.3})$$

donde $\langle D_{lp} \rangle$ es un promedio que permanece finito en el límite $L \rightarrow \infty$. En el límite continuo, cada campo de disipación introduce un factor L^3/τ_p como podemos ver en la ecuación (3.18), por lo tanto para el momento de orden dominante obtendremos

$$\langle \eta(x,t) \eta(x',t') \cdots \eta(x^{(n)},t^{(n)}) \rangle \sim \cancel{L^{n-1}} \tau_p^{1-n} \nu^n \langle D(x,t) \rangle \frac{\delta(x-x') \cdots \delta(x^{(n-1)}-x^{(n)})}{\cancel{L^{n-1}}} \times \frac{\tau_p^{n-1} \delta(t-t') \cdots \delta(t^{(n-1)}-t^{(n)})}{L^{3(n-1)}}, \quad (\text{A.4})$$

donde $\langle D(x,t) \rangle$ es el comportamiento dominante finito de $\langle D_{l,p} \rangle$ para $L \gg 1$. Además, hemos utilizado la “aproximación de equilibrio local” (sección 3.2.1) y la relación entre las deltas de Kronecker y las deltas de Dirac, **dadas por la** ec. (4.16). Usando ahora el ruido reescalado $\tilde{\eta}$, obtenemos la expresión 4.35

$$\langle \tilde{\eta}(x,t) \tilde{\eta}(x',t') \cdots \tilde{\eta}(x^{(n)},t^{(n)}) \rangle \sim L^{3-5n/2} \nu^n \langle D(x,t) \rangle \delta(x-x') \cdots \delta(x^{(n-1)}-x^{(n)}) \times \delta(t-t') \delta(t'-t'') \cdots \delta(t^{(n-1)}-t^{(n)}). \quad (\text{A.5})$$

Observamos que todos los momentos y cumulantes tienden a cero cuando $L \rightarrow \infty$, lo que prueba el carácter subdominante del ruido del campo de disipación en el límite hidrodinámico, donde el único ruido relevante será el de la corriente. Finalmente, hay que hacer notar que si hubiéramos escalado el ruido de la disipación con su propio exponente, esto es, con $L^{3/2}$ en lugar de $L^{1/2}$ en la ecuación (A.1), el prefactor en la ec. (A.5) cambiaría de $L^{3-5n/2}$ a $L^{3-3n/2}$. Con este escalamiento, de nuevo sólo sería distinto de cero el cumulante de segundo orden: el ruido del campo de disipación también es gaussiano en el límite hidrodinámico. En cualquier caso, es importante señalar que el carácter gaussiano o no gaussiano del ruido del campo de disipación es anecdótico en este contexto, una vez que la ecuación (A.5) muestra que es despreciable para $L \gg 1$.

Apéndice B

El problema variacional para un Lagrangiano con derivadas segundas

Vamos a analizar un problema variacional en el cual la acción está definida como la integral de un Lagrangiano con derivadas segundas,

$$\mathcal{S}[j] = \int_{x_1}^{x_2} dx \mathcal{L}(j, j', j''). \quad (\text{B.1})$$

La acción $\mathcal{S}[j]$ es un funcional del perfil $j(x)$ en el intervalo $x_1 \leq x \leq x_2$. El problema variacional surge cuando se busca el perfil óptimo $j(x)$ para el que el funcional $\mathcal{S}[j]$ es un extremo. Vamos a considerar un problema similar al analizado en esta tesis: estamos interesados en calcular G , definida como

$$G = - \underset{j(x)}{\text{mín}} \mathcal{S}[j]. \quad (\text{B.2})$$

Entonces, consideramos la variación $\delta\mathcal{S}$ del funcional cuando variamos un perfil dado de $j(x)$ a $j(x) + \delta j(x)$,

$$\delta\mathcal{S} = \int_{x_1}^{x_2} dx \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial j} \delta j + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial j'} \delta j' + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial j''} \delta j'' \right). \quad (\text{B.3})$$

Ahora, tenemos en cuenta que debe verificarse que

$$\delta j' = \frac{d}{dx} \delta j, \quad \delta j'' = \frac{d^2}{dx^2} \delta j, \quad (\text{B.4})$$

para integrar por partes (i) una vez el término proporcional a $\delta j'$ y (ii) dos veces el término proporcional a $\delta j''$. Llegamos así a

$$\delta \mathcal{S} = \left\{ \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial j'} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial j''} \right) \right] \delta j + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial j''} \delta j' \right\}_{x_1}^{x_2} + \int_{x_1}^{x_2} dx \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial j} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial j'} \right) + \frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial j''} \right) \right], \quad (\text{B.5})$$

donde hemos introducido la notación $[f]_{x_1}^{x_2} = f(x_2) - f(x_1)$. Por analogía con el problema habitual donde el Lagrangiano tiene sólo primeras derivadas, introducimos los momentos generalizados

$$p_j = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial j'} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial j''} \right), \quad p_{j'} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial j''}. \quad (\text{B.6})$$

De esta forma, el término de contorno tiene la forma usual, y la ec. (B.5) se puede escribir

$$\delta \mathcal{S} = [p_j \delta j + p_{j'} \delta j']_{x_1}^{x_2} + \int_{x_1}^{x_2} dx \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial j} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial j'} \right) + \frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial j''} \right) \right] \delta j. \quad (\text{B.7})$$

La condición de extremo es $\delta \mathcal{S} = 0$. Si los valores de j y j' están fijados en los contornos, tanto δj como $\delta j'$ son cero en $x_{1,2}$ y los términos de contorno son cero. En ese caso, como δj es arbitrario para $x_1 < x < x_2$, el perfil óptimo solución del problema variacional obedece la ecuación de Euler-Lagrange

$$\frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial j''} \right) - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial j'} \right) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial j} = 0, \quad (\text{B.8})$$

que es una ecuación diferencial de cuarto orden. La ecuación (B.8) se puede escribir como $dp_j/dx = \partial \mathcal{L}/\partial j$, que es formalmente idéntica a la ecuación de Euler-Lagrange usual. Las condiciones de contorno para la ecuación de Euler-Lagrange son los valores impuestos de j y j' en los contornos; cuatro condiciones para la ecuación diferencial de cuarto orden. Sin embargo, en algunos problemas físicos puede parecer que hay menos condiciones de contorno de las necesarias para determinar una solución única del problema variacional. En ese caso, como puntualiza Lanczos [53], la condición de extremo $\delta \mathcal{S} = 0$ nos proporciona las condiciones de contorno “extra”. Por ejemplo, si sólo tenemos fijados los valores de j' en los contornos (como es el caso del problema de la LDF que tratamos en esta tesis), tenemos que $\delta j'(x_1) = \delta j'(x_2) = 0$ pero $\delta j(x_1)$ y $\delta j(x_2)$ son parámetros libres. En este caso, $\delta \mathcal{S} = 0$ nos implica que

$$p_j(x_1) = p_j(x_2) = 0, \quad (\text{B.9})$$

usando la ecuación (B.7). La solución del problema variacional satisface entonces la ecuación de Euler-Lagrange (B.8) con los valores impuestos por j' en los extremos y las condiciones extra que nos da la ec. (B.9). De esta forma, obtenemos las cuatro condiciones necesarias para determinar completamente la solución de la ecuación de Euler-Lagrange. En general, el momento generalizado conjugado de la variable que no está fijada en los contornos debe anularse en los mismos.

La función G definida en (B.2) depende de los valores de j y j' en los contornos. Haciendo uso de la ec. (B.7), y teniendo en cuenta que el perfil óptimo $j(x)$ verifica la ecuación de Euler-Lagrange, tenemos que sobre la solución del problema,

$$\delta G = -p_{j,2}\delta j_2 - p_{j',2}\delta j'_2 + p_{j,1}\delta j_1 + p_{j',1}\delta j'_1. \quad (\text{B.10})$$

Donde hemos introducido la notación $p_{j,i} = p_j(x_i)$, $\delta j_i = \delta j(x_i)$, $i = 1, 2$. La ecuación (B.10) implica que

$$p_{j,2} = -\frac{\partial G}{\partial j_2}, \quad p_{j',2} = -\frac{\partial G}{\partial j'_2}, \quad p_{j,1} = \frac{\partial G}{\partial j_1}, \quad p_{j',1} = \frac{\partial G}{\partial j'_1}. \quad (\text{B.11})$$

La ec. (5.24) de esta tesis es la particularización de este resultado para (i) $x_2 = -x_1 = 1/2$, (ii) soluciones de la ecuación de Euler-Lagrange con paridad bien definida, en las cuales $p_{j,2} = p_{j,1}$, $p_{j',2} = -p_{j',1}$ y (iii) las condiciones de contorno de la ec. (5.19).

Apéndice C

El problema variacional con restricciones

Nuestro objetivo es encontrar el perfil óptimo de la corriente $j(x; d)$ que es la solución del problema variacional (5.17), con la condición adicional de que la disipación integrada d tenga un valor definido, como viene dado por la ec. (5.16). Entonces, debemos usar el procedimiento de los multiplicadores de Lagrange [52, 53] para buscar el extremo de

$$\mathcal{S}_\lambda[j] = \mathcal{S}[j] - \lambda \int_{-1/2}^{1/2} dx (j' + d) = \int_{-1/2}^{1/2} dx \mathcal{L}_\lambda(j, j', j'') \quad (\text{C.1})$$

donde

$$\mathcal{L}_\lambda(j, j', j'') = \mathcal{L}(j, j', j'') - \lambda(j' + d), \quad (\text{C.2})$$

y λ es un multiplicador de Lagrange. El extremo de \mathcal{S}_λ se obtiene de dos condiciones: (i) $\delta\mathcal{S}_\lambda = 0$, y (ii) $\partial\mathcal{S}_\lambda/\partial\lambda = 0$. La primera implica que

$$\frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{\partial\mathcal{L}_\lambda}{\partial j''} \right) - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial\mathcal{L}_\lambda}{\partial j'} \right) + \frac{\partial\mathcal{L}_\lambda}{\partial j} = 0, \quad (\text{C.3})$$

que es la ecuación de Euler-Lagrange para el Lagrangiano L_λ que contiene derivadas de segundo orden (véase el apéndice B). La condición (ii) nos lleva a la restricción sobre la disipación integrada, proporcionada por la ec. (5.16). Las condiciones de contorno para la ecuación de Euler-Lagrange son

$$j'(\pm 1/2) = -\nu R(T), \quad p_{\lambda j}(\pm 1/2) = 0, \quad (\text{C.4})$$

donde hemos introducido el momento generalizado conjugado de la corriente para el nuevo Lagrangiano \mathcal{L}_λ , como

$$p_{\lambda j} = \frac{\partial \mathcal{L}_\lambda}{\partial j'} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial \mathcal{L}_\lambda}{\partial j''} \right). \quad (\text{C.5})$$

Estas condiciones de contorno tienen su origen en (i) los valores de la densidad de energía impuestos por los baños térmicos en los extremos, $\rho(\pm 1/2) = T$ y (ii) la condición de mínimo $\delta S_\lambda = 0$, que nos da las condiciones adicionales necesarias cuando los valores de algunas de las variables no están fijados en los contornos. Una discusión más detallada de este punto puede verse en el apéndice B, y también la ref. [53].

Apéndice D

Traslación de las restricciones a las condiciones de contorno

Los momentos generalizados conjugados respectivos para la corriente, $p_{\lambda j}$, para el Lagrangiano \mathcal{L}_λ y p_j para el Lagrangiano original \mathcal{L} , verifican

$$p_{\lambda j} = p_j - \lambda, \quad (\text{D.1})$$

donde hemos tenido en cuenta la relación entre \mathcal{L}_λ y \mathcal{L} , ec. (C.2), y la definición de los momentos, ec. (B.6). Por otra parte, la ecuación de Euler-Lagrange (C.3) para \mathcal{L}_λ implica que

$$\frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial j''} \right) - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial j'} \right) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial j} = 0. \quad (\text{D.2})$$

El decir, también obtenemos la ecuación de Euler-Lagrange correspondiente al Lagrangiano original \mathcal{L} . Las condiciones de contorno (C.4) se pueden escribir como

$$j'(\pm 1/2) = -\nu R(T), \quad p_j(\pm 1/2) = \lambda, \quad (\text{D.3})$$

para lo que hemos utilizado la ec. (D.1). En consecuencia, nuestro problema variacional con restricciones se puede transformar en un problema sin restricciones, con el Lagrangiano original \mathcal{L} , su ecuación de Euler-Lagrange (D.2) y las condiciones de contorno (D.3). Después, ha de determinarse el valor desconocido en los contornos λ para el momento generalizado p_j imponiendo el valor de la disipación integrada d , ec. (5.16), de modo que $\lambda = \lambda(d)$. Según la discusión del apéndice B, $\lambda = 0$ es equivalente a no imponer restricciones en el problema variacional. De este modo, recuperaríamos los perfiles (y la disipación integrada) promedios, que

corresponden al mínimo absoluto de G o, equivalentemente, al máximo absoluto de la probabilidad. En este sentido, un valor distinto de cero de $\lambda = p_j(\pm 1/2)$ es una medida de la distancia a la que estamos del comportamiento hidrodinámico promedio.

Debido a la simetría existente en el problema (los dos baños térmicos en los extremos tienen la misma temperatura T), esperamos que los perfiles óptimos correspondientes sean una función par de x . De hecho, la ecuación de Euler-Lagrange (D.2) admite soluciones con paridad bien definida. Como el Lagrangiano posee la propiedad de simetría $\mathcal{L}(-j, j', -j'') = \mathcal{L}(j, j', j'')$, la ec. (D.2) tiene soluciones en las que j es una función impar en x , lo que implica que y (y por tanto ρ) es una función par en x . Por consiguiente, a partir de ahora nos centraremos en las soluciones simétricas del problema variacional. Así, la ec. (5.16) se reduce a

$$d = 2j(-1/2; d) = -2j(1/2; d), \quad (\text{D.4})$$

y las condiciones de contorno para la ecuación de Euler-Lagrange quedan

$$j'(\pm 1/2; d) = -\nu R(T), \quad j(-1/2; d) = -j(1/2; d) = d/2, \quad (\text{D.5})$$

mucho más simples que las ecs. (D.3), ya que hemos eliminado el multiplicador de Lagrange λ del problema. Esto proviene del carácter par de $p_j(x)$ para las soluciones con paridad bien definida que estamos considerando. En resumen, hemos transformado nuestro problema variacional con la restricción de que la disipación integrada tenga un valor dado d a un problema sin restricciones, con el Lagrangiano original $\mathcal{L}(j, j', j'')$ y valores dados de j y j' en los contornos.

Una vez hemos obtenido los perfiles óptimos de la corriente, el perfil óptimo de la densidad se calcula fácilmente a partir de la ec. (5.15). Por supuesto, el perfil de densidad obtenido de esta forma cumple las condiciones de contorno $\rho(\pm 1/2; d) = T$. Debemos insistir en que la ecuación de Euler-Lagrange (D.2) con condiciones de contorno (D.5) proporciona la solución correcta al problema variacional con restricciones siempre que los perfiles tengan una paridad bien definida. Sin embargo, no podemos descartar la existencia de soluciones que rompan la simetría y que no tengan paridad definida ya que, en general, un problema variacional puede tener varias soluciones [52]. Si ése fuera el caso, tendríamos que resolver el problema variacional completo, más complejo, constituido por la ec. de Euler-Lagrange (D.2) con las condiciones de contorno (D.3), donde el multiplicador de Lagrange $\lambda = \lambda(d)$ está impuesto por la ligadura (5.16). Sin embargo, todas

las simulaciones que hemos realizado apuntan a que las soluciones adoptadas por el sistema son simétricas, como se discute en el texto principal de esta memoria.

La LDF $G(d)$ depende de d y T a través de las condiciones de contorno. En este punto, es conveniente recordar que omitimos la dependencia en T para simplificar nuestra notación. Particularizando la ec. (B.10) para las soluciones con paridad bien definida,

$$\delta G(d) = p_j(1/2)\delta d + 2\nu \frac{dR(T)}{dT} p_{j'}(1/2)\delta T, \quad (\text{D.6})$$

lo que ofrece una interpretación geométrica para los valores de los momentos generalizados en los contornos. Están relacionados directamente con las derivadas parciales de la LDF,

$$\frac{\partial G}{\partial d} = p_j(1/2), \quad \frac{\partial G}{\partial T} = 2\nu \frac{dR(T)}{dT} p_{j'}(1/2). \quad (\text{D.7})$$

Los momentos generalizados p_j y $p_{j'}$ son funciones par e impar de x , respectivamente.

Apéndice E

Formulación hamiltoniana del problema

En general, la ecuación de Euler-Lagrange para el perfil óptimo $j(x; d)$ es una ecuación diferencial de cuarto orden. Podemos por tanto desarrollar una formulación equivalente “Hamiltoniana”, en la que tendremos un conjunto de cuatro ecuaciones diferenciales de primer orden acopladas. Para el problema que nos ocupa, esbozamos a continuación el procedimiento para introducir el Hamiltoniano a partir de un Lagrangiano con derivadas de orden mayor que uno [52, 53]. Como hemos comentado antes, la ecuación de Euler-Lagrange es una ecuación diferencial de cuarto orden, y tenemos dos coordenadas canónicas y dos momentos generalizados asociados. La primera coordenada canónica es la corriente j y elegimos que la segunda sea y , la cual es proporcional a j' , como viene dado por la ec. (5.15). Esta elección la sugiere la estructura de el Lagrangiano en la ec. (5.17). Ahora, introducimos los momentos canónicos p_y y p_j conjugados de y y j , respectivamente. Consistentemente con la deducción de la ecuación de Euler-Lagrange del apéndice B, la ec. (B.6) nos da directamente p_j , mientras que p_y está dado por

$$p_y \equiv -\nu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial j''}, \quad (\text{E.1})$$

que se sigue de la definición de $p_{j'}$ y de la relación entre y y j' , ec. (5.15). El Hamiltoniano se introduce del modo habitual,

$$\mathcal{H} \equiv y'p_y + j'p_j - \mathcal{L} \equiv y'p_y - \nu y p_j - \mathcal{L}. \quad (\text{E.2})$$

Tras algunas transformaciones algebraicas sencillas, se obtiene

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}Q(y)p_y^2 - \hat{D}^{-1}(y)jp_y - \nu yp_j, \quad (\text{E.3a})$$

$$Q(y) \equiv \frac{\hat{\sigma}(y)}{\hat{D}^2(y)}, \quad (\text{E.3b})$$

donde hemos definido la función auxiliar $Q(y)$, con $Q(y) > 0$ para todo y . También hemos usado la expresión de p_y

$$p_y = \hat{D}(y) \frac{j + \hat{D}(y)y'}{\hat{\sigma}(y)}, \quad (\text{E.4})$$

obtenida a partir de su definición (E.1), y del Lagrangiano

$$\mathcal{L} = \frac{\hat{\sigma}(y)p_y^2}{2\hat{D}^2(y)} = \frac{1}{2}Q(y)p_y^2, \quad (\text{E.5})$$

escrito en función de las variables canónicas con ayuda de la ec. (E.4). Como debe ser, \mathcal{H} es función de (y, j, p_y, p_j) , que obedecen el siguiente conjunto de cuatro ecuaciones diferenciales “canónicas” de primer orden,

$$y' = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_y} = Q(y)p_y - \hat{D}^{-1}(y)j, \quad (\text{E.6a})$$

$$j' = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_j} = -\nu y, \quad (\text{E.6b})$$

$$p_y' = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial y} = -\frac{dQ(y)}{dy} \frac{p_y^2}{2} + \frac{d\hat{D}^{-1}(y)}{dy} jp_y + \nu p_j, \quad (\text{E.6c})$$

$$p_j' = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial j} = \hat{D}^{-1}(y)p_y. \quad (\text{E.6d})$$

Estas ecuaciones canónicas son equivalentes a la ecuación de Euler-Lagrange de cuarto orden (D.2). Nótese que, como es normal en física y con objeto de no complicar las fórmulas, usamos la misma notación para las variables canónicas en el Hamiltoniano y para las soluciones de las ecuaciones canónicas, que proporcionan los perfiles óptimos solución del problema variacional. Por otro lado, el Hamiltoniano es una integral primera del sistema (E.6), ya que no depende explícitamente de x . Esto se traduce en que $\mathcal{H} = \text{const.}$, independiente de x , sobre cualquier solución. Esta propiedad puede usarse para simplificar la integración del problema.

En general, para un valor dado de la disipación d , tenemos que resolver el sistema de ecuaciones (E.6) con las condiciones de contorno

$$y(\pm 1/2) = R(T), \quad j(-1/2) = -j(1/2) = d/2, \quad (\text{E.7})$$

que son equivalentes a las de la ec. (D.5) De nuevo, tenemos que buscar soluciones con paridad bien definida: y y j funciones par e impar de x , respectivamente (además, p_y es impar y p_j es par). Dicha solución se inserta posteriormente en la expresión de la LDF $G(d)$, que se puede escribir como función de las variables canónicas,

$$G(d) = - \int_{-1/2}^{1/2} dx \mathcal{L} = -\frac{1}{2} \int_{-1/2}^{1/2} dx Q(y)p_y^2, \quad (\text{E.8})$$

combinando las ecs. (5.17) and (E.5). De esta forma, obtenemos la LDF para un valor arbitrario de la disipación integrada d en la formulación Hamiltoniana del problema variacional. La ec. (E.8) nos muestra claramente que los perfiles más probables (promedio) se corresponden con una solución en la que $p_y = 0$ para todo x , que es una condición necesaria y suficiente para que $G(d)$ se anule. Sustituyendo $p_y = 0$ en las ecs. (E.6c)-(E.6d), vemos que necesariamente $p_j = 0$, también para todo x . Además, las ecs. (E.6a) y (E.6b) se simplifican y dan lugar a la ec. (5.8), obteniéndose los perfiles promedio. Por lo tanto, siempre existe una solución de las ecuaciones canónicas (E.6) con los momentos canónicos nulos, que corresponde a la solución promedio de la ecuación hidrodinámica (5.8). Esos perfiles hidrodinámicos $\{\rho_{\text{av}}, j_{\text{av}}\}$ llevan al valor promedio de la disipación integrada

$$d_{\text{av}} = \nu \int_{-1/2}^{1/2} dx R(\rho_{\text{av}}) = \nu \int_{-1/2}^{1/2} dx y_{\text{av}}(x) = 2j_{\text{av}}(-1/2). \quad (\text{E.9})$$

Esta discusión es consistente con la desarrollada a continuación de la ec. (D.3), hecha en el ámbito de la formulación Lagrangiana equivalente. Las fluctuaciones llevan por tanto asociadas un valor no nulo de los momentos canónicos, cuyas magnitudes son una medida de la distancia $(d - d_{\text{av}})/d_{\text{av}}$ respecto al comportamiento promedio. Las ecs. (E.8) y (E.9) son idénticas a las ecs. (5.25) y (5.26) del texto principal de la memoria.

Apéndice F

Simulación de Monte Carlo de eventos raros: Evaluación directa de la función de grandes desviaciones

La observación y caracterización de los eventos raros en simulaciones por ordenador es una tarea difícil. Como su propio nombre indica el hecho de que sean raros hace que la estadística de los mismos sea pobre, ya que son exponencialmente improbables en el tiempo de observación y en el tamaño del sistema, $P(d, t) \sim e^{tLG(d)}$. Con las técnicas usuales de simulación Monte Carlo esto se hace impracticable puesto que deberíamos realizar $N \sim e^t$ simulaciones para tener una estadística suficiente. Por tanto se hace necesario recurrir a estrategias diferentes en las que podamos reducir este número. Para acceder a los eventos poco probables existe una estrategia general de simulación Monte Carlo (MC) denominada "Go with the winners" [58] basada en el control de una población de clones del sistema que nos interesa estudiar. Para ello se favorece la clonación de las copias del sistema que nos interesan y se suprimen los que no evolucionan adecuadamente.

Recientemente, Giardinà, Kurchan y Peliti [38] han introducido un algoritmo eficiente para medir la probabilidad de una desviación grande para observables aditivos promediados en el tiempo, como la corriente, o la disipación (nuestro caso) en sistemas de muchas partículas. El algoritmo está basado en la modificación de la dinámica microscópica del sistema para que dichos eventos raros responsables de una desviación no lo sean tanto y ha sido extendido para la dinámica estocástica a

tiempo continuo [39]. Sea $U_{C'C}$ la probabilidad de transición de pasar de una configuración del sistema C a otra C' . La probabilidad medir una disipación integrada D_t después de un tiempo t partiendo de una configuración C_0 se puede escribir como

$$P(D_t, t; C_0) = \sum_{C_t \cdots C_1} U_{C_t C_{t-1}} \cdots U_{C_1 C_0} \delta(D_t - \sum_{k=0}^{t-1} D_{C_{k-1} C_k}), \quad (\text{F.1})$$

donde $D_{C'C}$ es la disipación elemental involucrada en la transición $C \rightarrow C'$. Para tiempos largos esperamos que la información del estado inicial C_0 se pierda, $P(D_t, t; C_0) \rightarrow P(D_t, t)$. En este límite $P(D_t, t)$ obedece un principio de grandes desviaciones $P(D_t, t) \sim \exp[+tL\mathcal{G}(d = D_t/t)]$. En la mayoría de los casos es conveniente trabajar con la función generadora de momentos de la distribución anterior

$$\Pi(\lambda, t) = \sum_{D_t} e^{D_t \lambda} P(D_t, t) = \sum_{C_t \cdots C_1} U_{C_t C_{t-1}} \cdots U_{C_1 C_0} e^{\sum_{k=0}^{t-1} D_{C_{k-1} C_k} \lambda} \quad (\text{F.2})$$

Para tiempos t grandes, tenemos que $\Pi(\lambda, t) \rightarrow \exp[+t\mu(\lambda)]$, con $\mu(\lambda) = \max_d [\mathcal{G}(d) + \lambda d]$. Podemos definir ahora la dinámica modificada, $\tilde{U}_{C'C} \equiv e^{D_{C'C} \lambda} U_{C'C}$, por lo tanto

$$\Pi(\lambda, t) = \sum_{C_t \cdots C_1} \tilde{U}_{C_t C_{t-1}} \cdots \tilde{U}_{C_1 C_0}. \quad (\text{F.3})$$

Es importante hacer notar que sin embargo esta dinámica no está normalizada, $\sum_{C'} \tilde{U}_{C'C} \neq 1$.

Ahora introducimos la notación de Dirac de “bra”, y “ket”, útil en el contexto del formalismo cuántico hamiltoniano de la ecuación maestra [59, 60], véase también [39, 61]. La idea consiste en asignar a cada configuración del sistema C un vector $|C\rangle$ en el espacio de las fases, junto con su vector transpuesto $\langle C|$, formando una base ortogonal para el espacio complejo y su dual [59, 60]. Por ejemplo, en el caso más simple de un sistema con un número finito de configuraciones (nótese que no es el caso de nuestro modelo), uno podría escribir $|C\rangle^T = \langle C| = (\cdots 0 \cdots 0, 1, 0 \cdots 0 \cdots)$, es decir todos los componentes igual a cero, excepto 1 para la componente que se corresponde con la configuración C . En esta notación, $\tilde{U}_{C'C} = \langle C' | \tilde{U} | C \rangle$ y la distribución de probabilidades se puede escribir como un vector de probabilidades

$$|P(t)\rangle = \sum_C P(C, t)|C\rangle, \quad (\text{F.4})$$

donde $P(C, t) = \langle C|P(t)\rangle$ con el producto escalar $\langle C'|C\rangle = \delta_{C'C}$. Si $\langle s| = (1 \cdots 1)$, la normalización implica que $\langle s|P(t)\rangle = 1$.

Con esta notación podemos escribir la descomposición espectral $\tilde{U}(\lambda) = \sum_j e^{\Lambda_j(\lambda)} |\Lambda_j^R(\lambda)\rangle \langle \Lambda_j^L(\lambda)|$ donde asumimos que existe una base completa biortogonal de autovalores a derechas y a izquierdas para la matriz \tilde{U} , $\tilde{U}|\Lambda_j^R(\lambda)\rangle = e^{\Lambda_j(\lambda)}|\Lambda_j^R(\lambda)\rangle$ y $\langle \Lambda_j^L(\lambda)|\tilde{U} = e^{\Lambda_j(\lambda)}\langle \Lambda_j^L(\lambda)|$. Llamando $e^{\Lambda(\lambda)}$ al autovalor mas grande de $\tilde{U}(\lambda)$, y a sus vectores por la derecha $|\Lambda_j^R(\lambda)\rangle$ y por la izquierda $\langle \Lambda_j^L(\lambda)|$ respectivamente, y escribiendo $\Pi(\lambda, t) = \sum_{C_t} \langle C_t|\tilde{U}^t|C_0\rangle$, encontramos para tiempos largos

$$\Pi(\lambda, t) \rightarrow e^{+t\Lambda_j(\lambda)} \langle \Lambda_j^L(\lambda)|C_0\rangle \left(\sum_{C_t} \langle C_t|\Lambda_j^R(\lambda)\rangle \right). \quad (\text{F.5})$$

De esta forma tenemos $\mu(\lambda) = \Lambda(\lambda)$, por tanto la transformada de Legendre de la función de grandes desviaciones de la corriente esta dada por el logaritmo del auto valor más grande de $\tilde{U}(\lambda)$. Con objeto de evaluar este autovalor, y dado que la dinámica \tilde{U} no está normalizada, introducimos la probabilidad de escape del sistema $Y_C = \sum_{C'} \tilde{U}_{C'C}$ y definimos la dnámica modificada $U'_{C'C} \equiv \frac{\tilde{U}_{C'C}}{Y_C}$. Por consiguiente, con esta dinámica modificada convenientemente normalizada

$$\Pi(\lambda, t) = \sum_{C_t \cdots C_1} Y_{C_{t-1}} U'_{C_t C_{t-1}} \cdots Y_{C_0} U'_{C_1 C_0}. \quad (\text{F.6})$$

Esta suma sobre las tratectorias que sigue el sistema se puede realizar considerando un conjunto de $M \gg 1$ copias o clones del sistema, evolucionando secuencialmente de acuerdo con el siguiente esquema de simulación Montecarlo [38]:

1. Cada copia evoluciona independientemente de acuerdo con la dinámica modificada $U'_{C'C}$.
2. Cada copia $m \in [1, M]$ (en una configuración $C_t[m]$ en el tiempo t) se clona con probabilidad $Y_{C_t[m]}$. Esto significa que, para cada copia $m \in [1, M]$, generamos un número $K_{C_t[m]} = \lfloor Y_{C_t[m]} \rfloor + 1$ de clones idénticos con probabilidad $Y_{C_t[m]} - \lfloor Y_{C_t[m]} \rfloor$, o $K_{C_t[m]} = \lfloor Y_{C_t[m]} \rfloor$ en caso contrario, donde $\lfloor x \rfloor$ representa la parte entera de x . Nótese que si $K_{C_t[m]} = 0$ la copia debe ser eliminada y no producir descendencia. Este procedimiento produce un total de $M'_t = \sum_{m=1}^M K_{C_t[m]}$ tras clonar todas las copias originales M .

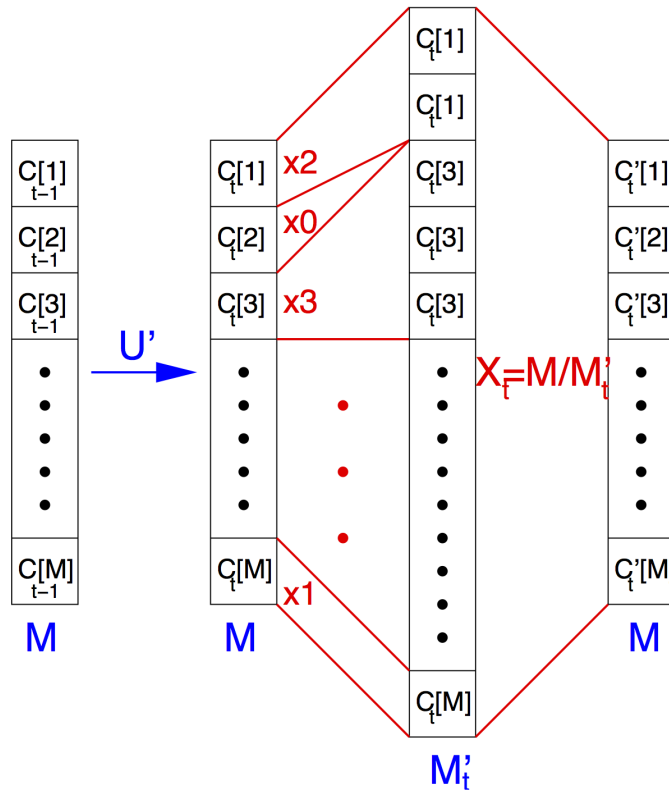


FIGURA F.1: Representación de la evolución y clonación de las copias durante la evaluación de la LDF

- Una vez todas las copias han evolucionado y se han clonado, el número total de copias M'_t se lleva de nuevo al valor original M con una probabilidad de clonación uniforme $X_t = M/M'_t$, manteniendo así el número de clones constante.

La figura F.1 esboza este procedimiento. Se puede demostrar que, para tiempos grandes, podemos recuperar $\mu(\lambda)$ por medio de la expresión

$$\mu(\lambda) = -\frac{1}{t} \ln(X_t \cdots X_0), \quad t \gg 1. \quad (F.7)$$

Para derivar esta expresión, consideremos primero la dinámica anterior, pero sin mantener el número de clones constantes (saltándonos el paso 3). En este caso, para una historia dada $\{C_t, \dots, C_0\}$, el número de clones $N(C_t \cdots C_0, t)$ en la configuración C_t en el instante t será $N(C_t \cdots C_0, t) = Y_{C_{t-1}} U'_{C_t C_{t-1}} N(C_{t-1} \cdots C_0, t-1)$, así que

$$N(C_t \cdots C_0, t) = Y_{C_{t-1}} U'_{C_t C_{t-1}} \cdots Y_{C_0} U'_{C_1 C_0} N(C_0, 0). \quad (F.8)$$

Sumando sobre todas las historias de duración t , véase la eq. (F.6), encontramos que el número total promedio de clones para tiempos largos, muestra un comportamiento exponencial, $\langle N(t) \rangle = \sum_{C_t \dots C_1} N(C_t \cdot C_0, t) \sim N(C_0, 0) \exp[+t\mu(\lambda)]$. Ahora, volviendo al paso 3, cuando el número fijado de copias M es suficientemente grande, tenemos el factor global de copias $X_t = \langle N(t-1) \rangle / \langle N(t) \rangle$, por tanto $X_t \cdots X_1 = \langle N(C_0, 0) \rangle / \langle N(t) \rangle$ y recuperamos la expresión (F.7) para $\mu(\lambda)$.

En esta tesis hemos usado el este método para medir la LDF de corriente para la clase general de modelos descritos en el capítulo 3. Para este modelo, la probabilidad de transición de una configuración $C = \{\rho_1 \cdots \rho_N\}$ a otra configuración $C'_y = \{\rho_1 \cdots \rho'_y, \rho'_{y+1} \cdots \rho_N\}$, con $y \in [0, N]$ donde el par (ρ'_y, ρ'_{y+1}) ha colisionado según las ec. 3.3 y 3.4, por simplicidad consideramos el caso $\beta = 0$, se puede escribir como eq. 3.5

$$U_{C'_y C} = \begin{cases} (N+1)^{-1}, & y \in [1, N-1] \\ \frac{\beta e^{\beta \rho_1}}{N+1} E_1[\beta \max(\rho_1, \rho'_1)], & y = 0 \\ \frac{\beta e^{\beta \rho_1}}{N+1} E_1[\beta \max(\rho_1, \rho'_1)], & y = N \end{cases} \quad (\text{F.9})$$

Donde $E_1(x) = -Ei(-x)$, y $Ei(x)$ es la función integral exponencial, o

$$E_1(x) = \int_x^\infty du \frac{e^{-u}}{u} \quad (\text{F.10})$$

Que aparece cuando integramos sobre todos los posibles pares $(p, \tilde{\rho}_{L,R})$ que pueden dar como resultado un $\rho'_{1,N}$ dado, véase la eq. 3.4. Es fácil ver que $U_{C'_y C}$ está normalizado. Con objeto de medir las fluctuaciones de la disipación recordamos la definición de la disipación que se produce en cada paso microscópico. Teniendo en cuenta la ecuación 3.9, podemos escribir

$$D_{C'_y C} = \begin{cases} \frac{-(1-\alpha)\rho_y}{N-1}, & y \in [1, N-1] \\ 0 & y = 0, N \end{cases} \quad (\text{F.11})$$

De esta forma podemos medir la energía que se disipa en el seno del sistema, usando esta definición de la energía disipada, podemos escribir la dinámica modificada normalizada $U'_{C'_y C} \equiv \frac{\tilde{U}_{C'_y C}}{Y_C} e^{\lambda D_{C'_y C}}$ que para $y \in [1, N-1]$ queda

$$U'_{C'_y C} = \frac{e^{-\bar{\lambda}(1-\alpha)\rho_y}}{Y_C(N+1)} \quad (\text{F.12})$$

con $\bar{\lambda} = \lambda/(N - 1)$, mientras que para $y = 0, N$ tendremos $U'_{C_y C} \equiv \frac{\tilde{U}'_{C_y C}}{Y_C}$. La probabilidad de escape del sistema quedará

$$Y_C = \frac{2}{N + 2} + \sum_{y=1}^{N-1} \frac{e^{-\bar{\lambda}(1-\alpha)\rho_y}}{N + 1} \quad (\text{F.13})$$

Bibliografía

- [1] A. Einstein. *Investigation on the Theory of, the Brownian Movement*. Dover Publications (1926).
- [2] L. Boltzmann. *Lectures on Gas Theory*. Dover (1989).
- [3] J. W. Gibbs. *Elementary Principles in Statistical Mechanics*. Yale University Press (1902).
- [4] A. Einstein. *Ann. Phys.*, **14** 354 (1904).
- [5] M. Smoluchowski. *Ann. Phys.*, **21** 756 (1906).
- [6] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Statistical Physics 3rd edition Course of Theoretical Physics Vol. 5*. Pergamon Press. Oxford (1980).
- [7] J. D. Deuschel and D. W. Stroock. *Large Deviations*. Academic Press, Boston (1989).
- [8] A. Dembo and O. Zeitouni. *Large Deviations Techniques and Applications*. Springer, New York (1998).
- [9] H. Touchette. *Phys. Rep.*, **478** 1 (2009).
- [10] B. Derrida. *Non-equilibrium steady state: Fluctuations and large deviations of the density and of the current*. *J. Stat. Phys.*, 07023 (2007).
- [11] L. Bertini, A. D. Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio and C. Landim. *Stochastic interacting particle systems out of equilibrium*. *J. Stat. Mech. (Theor. Exp.)*, P07014 (2007).
- [12] D. Ruelle. *Statistical Mechanics: Rigorous Results*. W. A. Benjamin, Amsterdam (1969).
- [13] O. E. Lanford. *Entropy and equilibrium states in classical statistical mechanics, in Statistical Mechanics and Mathematical Problems, Lecture notes in Physics, vol.20*. Springer, Berlin (1973).

-
- [14] R. Ellis. *Entropy, Large Deviations and Statistical Mechanics*. Springer, New York (1985).
- [15] S. Goldstein. *Boltzmann approach to statistical mechanics, in Chance in Physics: Foundations and Perspectives, Lecture Notes in Physics, vol. 574*. Springer, Berlin (2001).
- [16] S. Goldstein and J. L. Lebowitz. *On the (boltzmann) entropy of non-equilibrium systems*. *Physica D*, **1-4** 53 (2004).
- [17] A. Campa, T. Dauxois and S. Ruffo. *Statistical mechanics and dynamics of solvable models with long-range interactions*. *Phys. Rep.*, **480** 57 (2009).
- [18] N. G. V. Kampen. *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*. North-Holland Personal Library (1992).
- [19] H. Touchette and R. J. Harris. *Book chapter. Nonequilibrium Statistical Physics of Small Systems: Fluctuation Relations and Beyond*. WILEY-VCH, Weinheim (2013).
- [20] H. Touchette. web H Touchette notes (2007).
- [21] L. Bertini, A. D. Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio and C. Landim. *Phys. Rev. Lett.*, **87** 040601 (2001).
- [22] L. Bertini, A. D. Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio and C. Landim. *Phys. Rev. Lett.*, **94** 030601 (2005).
- [23] L. Bertini, A. D. Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio and C. Landim. *J. Stat. Phys.*, **135** 857 (2009).
- [24] P. Hurtado and P. Garrido. *Phys. Rev. Lett.*, **107** 180601 (2011).
- [25] C. Pérez-Espigares, J. del Pozo, P. Garrido and P. Hurtado. In *AIP Conference Proceedings*, volume 1332, 204 (2011).
- [26] H. Spohn. *Large Scale Dynamics of Interacting Particles*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg (1991).
- [27] T. Bodineau and B. Derrida. *Phys. Rev. Lett.*, **92** 180601 (2004).
- [28] P. Hurtado and P. Garrido. *Phys. Rev. Lett.*, **102** 250601 (2009).
- [29] P. Hurtado and P. Garrido. *Phys. Rev. E*, **81** 041102 (2010).

- [30] T. Bodineau and B. Derrida. Phys. Rev. E, **72** 066110 (2005).
- [31] L. Onsager and S. Machlup. Phys. Rev., **91** 1505 (1953).
- [32] G. Gallavotti and E. Cohen. Phys. Rev. Lett., **74** 2694 (1995).
- [33] P. Hurtado, C. Pérez-Espigares, J. del Pozo and P. Garrido. J. Stat. Phys., aceptado (2014).
- [34] P. Hurtado and P. Garrido. J. Stat. Mech. (Theor. Exp.), P02032 (2009).
- [35] C. P. Espigares, P. L. Garrido and P. I. Hurtado. Phys. Rev. E, **87** 032115 (2013).
- [36] P. Hurtado, C. Pérez-Espigares, J. del Pozo and P. Garrido. Proc. Natl. Acad. Sci., **108** 7704 (2011).
- [37] C. Kipnis, C. Marchioro and E. Presutti. J. Stat. Phys., **27** 65 (1982).
- [38] C. Giardinà, J. Kurchan and L. Peliti. Phys. Rev. Lett., **96** 120603 (2006).
- [39] V. Lecomte and J. Tailleur. J. Stat. Mech. (Theor. Exp.), P03004 (2007).
- [40] P. Resibois and M. D. Leener. *Classical Kinetic Theory of Fluids*. John Wiley and Sons (1977).
- [41] P. I. Hurtado and P. L. Krapivsky. Phys. Rev. E, **85** 060103(R) (2012).
- [42] J. Lebowitz and H. Spohn. J. Stat. Phys., **95** 333 (1999).
- [43] T. Bodineau and M. Lagouge. J. Stat. Phys., **139** 201 (2010).
- [44] G. Eyink, J. L. Lebowitz and H. Spohn. Commun. Math. Phys., **132** 253 (1990).
- [45] A. Prados, A. Lasanta and P. Hurtado. Phys. Rev. Lett., **107** 140601 (2011).
- [46] T. Pöschel and S. Luding, eds. *Granular Gases*. Lecture Notes in Physics vol. 564. Springer-Verlag, Berlin (2001).
- [47] C. Giberti and L. Rondoni. Phys. Rev. E, **83** 041115 (2011).
- [48] S. Lepri, R. Livi and A. Politi. Phys. Rep., **377** 1 (2003).
- [49] U. Marconi, A. Puglisi, L. Rondoni and A. Vulpiani. Phys. Rep., **461** 111 (2008).

-
- [50] J. Brey, M. G. de Soria and P. Maynar. EPL (Europhysics Letters), **84** 24002 (2008).
- [51] A. Prados, A. Lasanta and P. I. Hurtado. Phys. Rev. E, **86** 031134 (2012).
- [52] I. M. Gelfand and S. V. Fomin. *Calculus of Variations*. Dover, New York (2000).
- [53] C. Lanczos. *The Variational Principles of Mechanics*. Dover, New York (1986).
- [54] C. M. Bender and S. A. Orszag. *Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers*. New York, Springer (1999).
- [55] J. P. Boon, J. F. Lutsko and C. Lutsko. Phys. Rev. E, **85** 021126 (2012).
- [56] C. Giardinà, J. Kurchan, V. Lecomte and J. Tailleur. J. Stat. Phys., **145** 787 (2011).
- [57] A. Puglisi, P. Visco, A. Barrat, E. Trizac, and F. van Wijland. Phys. Rev. Lett., **95** 110202 (2005).
- [58] P. Grassberger. Comp. Phys. Comm., **147** 64 (2002).
- [59] R. J. Harris and G. M. Schülz. J. Stat. Mech. (Theor. Exp.), P07020 (2007).
- [60] G. M. Schülz. In C. Domb and J. L. Lebowitz, eds., *Phase Transitions and Critical Phenomena*, volume 19. Academic, London (2001).
- [61] A. Rákos and R. J. Harris. J. Stat. Mech. (Theor. Exp.), P05005 (2008).

Índice de figuras

2.1.	Representación de una curva típica de una función de tasa $I(x)$ (línea azul), junto con su aproximación gausiana (línea roja), válida para fluctuaciones pequeñas. Vemos que la probabilidad de un valor $x \gg \tilde{x}$ es típicamente mayor para la función $I(x)$ que para la aproximación gausiana.	26
2.2.	(a) Fluctuaciones de la densidad en un subsistema con volumen v para un sistema en equilibrio. (b) Convergencia de la corriente integrada en el espacio y el tiempo a su valor típico $\langle q \rangle$ para diferentes realizaciones del sistema (nube de líneas superior), y una representación de la concentración de la probabilidad asociada con el LDP cuando el tiempo crece. (c) Curva típica de una función de grandes desviaciones. (d) Esquema de una situación típica en un sistema fuera del equilibrio con un gradiente de temperatura.	30
2.3.	Representamos el modelo de Kipnis-Marchioro-Presutti de transporte en redes 1D bajo diferentes condiciones de contorno. Arriba: Sistema acoplado a baños térmicos a diferentes temperaturas $T_L \neq T_R$. Abajo: Condiciones de contorno periódicas. Cada sitio de la red está caracterizado por una energía $\rho_i \geq 0$, $i \in [0, N]$, y la dinámica se introduce mediante colisiones entre los vecinos más próximos, redistribuyéndose la energía dentro del par que colisiona.	39
2.4.	(a) Transformada de Legendre de la LDF de la corriente para el modelo KMP en una dimensión con un gradiente de temperatura ($\rho_L = 2, \rho_R = 1$) y (b) en equilibrio ($\rho_L = 1,5 = \rho_R$). Los símbolos se corresponden con las simulaciones numéricas, las líneas continuas con las predicciones teóricas basadas en la conjetura de aditividad, y las líneas discontinuas a la aproximación gausiana. Las líneas verticales señalan la transición entre los perfiles monótonos (región interna) y no monótonos de los perfiles óptimos (región externa). Nótese que los perfiles en equilibrio no son monótonos para todas las fluctuaciones de la corriente. Los “inset” de los paneles (a) y (b) miden la relación de Gallavotti-Cohen representando la diferencia $\mu(\lambda) - \mu(-\lambda - 2\varepsilon)$ en el caso (a) y $\mu(\lambda) - \mu(-\lambda)$ en el caso (b). Los paneles de la derecha se corresponden al exceso de temperatura en los perfiles para diferentes fluctuaciones de la corriente, (c) para un sistema sujeto a un gradiente de temperatura, ($\rho_L = 2, \rho_R = 1$) y (d) en equilibrio ($\rho_L = 1,5 = \rho_R$). En todos los casos existe un buen acuerdo entre las predicciones teóricas basadas en la hipótesis de aditividad y los resultados numéricos, en el rango de validez del método computacional.	42

- 3.1. Esquema de la clase de modelos de red monodimensionales descrita en el texto. La variable ρ_l denota la energía del sitio l -ésimo, $l = 1, \dots, N$, y T_L y T_R son las temperaturas de los baños térmicos a los que se encuentra acoplado el sistema. La dinámica es estocástica y consiste en colisiones aleatorias entre pares de vecinos más próximos, en las que parte de la energía se disipa al entorno y el resto se redistribuye aleatoriamente dentro del par. 46
- 3.2. Decaimiento con el tiempo de la energía promedio por sitio para un sistema aislado en nuestra clase general de modelos disipativos. Hemos representado datos para $\nu = 1$, $L = 80$, y valores diferentes de $\beta \in [0, 2]$. Un comportamiento similar se observa para valores distintos de ν y L . La líneas se corresponden a las predicciones teóricas, véase la Eq. (3.58). 59
- 3.3. Perfiles de la densidad de energía promedio para diferentes valores de $\nu \in [10^{-1}, 10^3]$ y $\beta = 0, 0,5, 1$, en un sistema de tamaño $N = 160$. La temperatura de los baños es $T = 1$ siempre. Las líneas se corresponden a las predicciones teóricas, y el acuerdo entre teoría y simulación es excelente en todos los casos. 61
- 3.4. Perfiles de exceso de la densidad de energía promedio para $\nu = 10$, $\beta = 0,5$, y diferentes valores de $L \in [10, 160]$. Las correcciones de tamaño finito disminuyen rápidamente a cero con el tamaño del sistema. 62
- 3.5. Resistencia térmica de borde como función del tamaño del sistema L , para distintos valores de $\nu \in [10^{-3}, 10^2]$ y $\beta = 0,5, 1$. En todos los casos el salto térmico en los contornos decae como L^{-1} , con una amplitud que crece con ν 63
- 3.6. Perfiles de corriente promedio para diferentes valores de $\nu \in [10^{-1}, 10^3]$, $\beta = 0$ y $N = 160$. Nótese la estructura no trivial debido a la disipación en el seno del sistema, lo que contrasta con el comportamiento encontrado en los sistemas conservativos, donde el campo de corriente es homogéneo. Las líneas se corresponden con las predicciones teóricas, y el acuerdo teoría-simulación es excelente en todos los casos. 64
- 3.7. Perfiles del campo de disipación promedio para diferentes valores de $\nu \in [10^{-1}, 10^3]$ y $\beta = 0, 0,5, 1$, para $N = 160$. La temperatura del baño es $T = 1$ en todos los casos. La líneas se corresponden con las predicciones teóricas, que reproducen de manera excelente los datos numéricos. 65
- 3.8. Coeficiente de transporte de la disipación $R(\rho)$ medido en las simulaciones, como función de la densidad de energía promedio local, para diferentes valores de ν , β y L . Para cada valor de β considerado, los datos numéricos colapsan con la predicción teórica $\rho^{\beta+1} \forall \nu, L$ 66
- 3.9. Comparación entre los valores teóricos y numéricos de la difusividad $D(\rho)$ para $\beta = 0, 0,5, 1$. Hemos considerado distintos valores de ν y L . El acuerdo entre teoría y simulación es excelente. 66

4.1. Comparación entre las medidas numéricas de la movilidad $\sigma(\rho)$, obtenidas a partir de la igualdad (4.36), y la predicción teórica, dada por las ecs. (4.15) y (3.57), para $\beta = 0, 0,5, 1$. El acuerdo es excelente en todos los casos, incluso para tamaños del sistema relativamente pequeños ($L = 10$). Las curvas para $\beta = 0,5$ ($\beta = 1$) se han desplazado verticalmente 0,3 (0,6) unidades. El recuadro muestra la misma figura en escala logarítmica. 77

4.2. Comparación entre la medida numérica de la parte diagonal de $\kappa(\rho)$, según la Ec. (4.37), y la predicción teórica de la ec. (4.31a), para $\beta = 0, 0,5, 1$ y diferentes valores de ν y L . Las curvas para $\beta = 0,5$ ($\beta = 1$) se han desplazado verticalmente 0,3 (0,6) unidades para una mayor claridad. 79

5.1. Convergencia de la disipación integrada en el espacio y en el tiempo a su valor promedio para diferentes realizaciones. También presentamos un esbozo de la concentración de la probabilidad con el tiempo, asociada con el principio de grandes desviaciones. 85

5.2. Distribución de probabilidad de la disipación integrada d , integrada en el espacio y el tiempo τ , representada frente a la variable reducida $(d - d_{av})/\chi$ (de varianza unidad) para diferentes valores de $\nu \in [10^{-3}, 10^3]$, para el caso $\beta = 0$. Recuadro: gráfica semilog con los mismos datos. En ambos casos la línea es la distribución gaussiana, que ajusta bien los datos para las fluctuaciones típicas. Por otra parte, se observa cierta asimetría en las colas, que comienzan a alejarse del comportamiento gaussiano. 101

5.3. Disipación promedio y varianza medidas en las simulaciones, como función de ν para $\beta = 0$. La línea continua representa la predicción teórica para d_{av} , ec. (5.79), mientras que la discontinua es la estimación gaussiana para el parámetro de la varianza de la disipación, Λ_ν^2 , véase la ec. (5.83). El acuerdo es excelente en todos los casos. Nótese en particular el escalamiento con ν de ambos observables en los límites $\nu \ll 1$ y $\nu \gg 1$ 103

5.4. Escalamiento de la LDF en el límite $\nu \ll 1$ para $N = 50, T = 1, \beta = 0, 0,5, 1$ y dos valores diferentes de $\nu, \nu = 0,01$ (símbolos rellenos) y $\nu = 0,1$ (símbolos huecos). Las líneas continuas son las predicciones de la MFT. Las curvas se han desplazado verticalmente por conveniencia, $G(d_{av}) = 0, \forall \nu, \beta$. Para el caso de $\beta = 0$, las curvas de las simulación se han representado para $d < d_I$, con d_I el punto de inflexión en el cual $G(d)$ cambia su convexidad (véase también la Fig. 5.5). Recuadro: Comparación de la $G(d)$ teórica de los distintos β , donde puede verse claramente que un aumento de β favorece las fluctuaciones grandes de la disipación. 106

- 5.5. Gráfico escalado de la transformada de Legendre de la LDF de la disipación, $\mu(s) = \max_d[G(d) + sd]$, en el límite $\nu \ll 1$ para $N = 50$, $T = 1$, $\beta = 0$ y dos valores distintos de ν , $\nu = 0,01$ (círculos) y $\nu = 0,1$ (triángulos). La línea continua es la predicción de la MTF, ec. (5.95). Nótese que $\mu(s)$ está definido hasta el valor umbral $s_I = 0,878458/d_{av}$, más allá del cual la transformada de Legendre-Fenchel diverge. El recuadro de arriba-derecha muestra un zoom alrededor de dicho umbral s_I , que está relacionado con el punto de inflexión de $G(d)$ en $d_I = 2,27672d_{av}$. En el recuadro del centro-izquierda se ve que $G''(d_I) = 0$, para $d > d_I$ la LDF de la disipación no es convexa. 107
- 5.6. Arriba: Perfiles de energía óptimos al variar d/d_{av} , medidos para $\nu = 10^{-3}$ (símbolos) y $\nu = 10^{-2}$ (líneas discontinuas), y las predicciones de la MFT (líneas continuas). Todas las curvas corresponden al caso lineal $\beta = 0$. El acuerdo entre teoría y simulación es excelente en todos los casos. Abajo: Predicciones de la MFT para los perfiles óptimos de energía, variando d/d_{av} 110
- 5.7. Colapso de los perfiles óptimos de la energía medidos para $N = 50$ y $T = 1$, como función de la disipación relativa d/d_{av} , para diferentes valores de $\nu \ll 1$. Concretamente, hemos representado los perfiles correspondientes a $\nu = 10^{-2}$ (líneas punteadas) y $\nu = 10^{-1}$ (líneas discontinuas), para $\beta = 0$ (arriba, verde), $\beta = 0,5$ (en medio, rojo) y $\beta = 1$ (abajo, azul). Todas las curvas están desplazadas verticalmente para facilitar su visualización, $\rho = 1$ en los extremos siempre. Para un valor dado de la disipación integrada relativa d/d_{av} , la sobre inyección central es menos pronunciada cuanto más grande es β . Las líneas continuas son las predicciones de la MFT. 111
- 5.8. La LDF de la disipación para $N = 50$, $T = 1$, $\beta = 0, 0,5, 1,0$ y $\nu \in [10^{-2}, 10]$. Las curvas para $\beta = 0,5$ y 0 se han desplazado verticalmente por conveniencia (recuérdese que $G(d_{av}) = 0 \forall \nu, \beta$); los valores $\beta = 1, 0,5$ y 0 se corresponden con las curvas de arriba (azul), centro (rojo) y abajo (verde). Las predicciones de la MFT se representan con líneas continuas para $\beta = 1$, discontinuas para $\beta = 0,5$, y punteadas para $\beta = 0$. Igual que en la fig. 5.4, para un ν fijado, aumentar β facilita las fluctuaciones grandes de la disipación. 112
- 5.9. Arriba: Perfiles óptimos de la energía como función de la disipación relativa medida para $\nu = 10$, $N = 50$ and $T = 1$, en el caso particular $\beta = 0$. La líneas discontinuas verdes corresponden a la simulación mientras que las líneas continuas son las predicciones de la MFT. Abajo: Perfiles óptimos de la energía para $\nu = 10$, $N = 50$ y $T = 1$, al variar el exponente β , $\beta = 0$ (línea de puntos verde), $\beta = 0,5$ (línea discontinua roja), y $\beta = 1$ (línea continua azul). La curvas se han desplazado verticalmente por conveniencia, $\rho = 1$ siempre en los contornos. Para una disipación integrada d dada, la concentración de la energía cerca de los contornos disminuye al crecer β 113

F.1. Representación de la evolución y clonación de las copias durante la evaluación de la LDF 140

