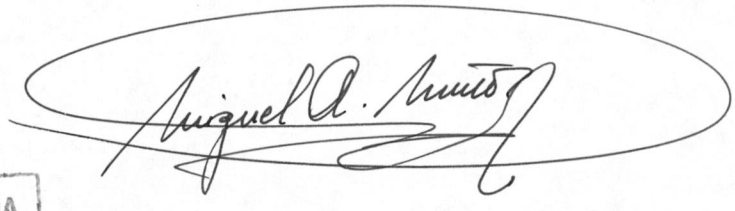
T
13
106

Ecuaciones de Fokker-Planck y Teoría de Campos Fuera del Equilibrio

Miguel Angel Muñoz Martínez

Tesis Doctoral
Departamento de Física Aplicada
Universidad de Granada



BIBLIOTECA UNIVERSITARIA
GRANADA
Nº Documento: 2155113
Nº Copia: 1/2/2011/0

UNIVERSIDAD DE GRANADA
1 8 MAR. 1994
COMISION DE DOCTORADO

D. Pedro L. Garrido Galera, Profesor titular de la Universidad de Granada,

CERTIFICA: que la presente memoria, *Ecuaciones de Fokker-Planck y teoría de campos fuera del equilibrio*, ha sido realizada bajo su dirección, en el Departamento de Física Aplicada de la Universidad de Granada, y que constituye la tesis doctoral de D. Miguel Angel Muñoz Martínez.

Granada, 18 de Marzo de 1994.

P.L. GARRIDO

Fdo.: Pedro L. Garrido Galera.

D. Pedro L. Garrido Galera, Profesor titular de la Universidad de Granada,

CERTIFICA: que la presente memoria, *Ecuaciones de Fokker-Planck y teoría de campos fuera del equilibrio*, ha sido realizada bajo su dirección, en el Departamento de Física Aplicada de la Universidad de Granada, y que constituye la tesis doctoral de D. Miguel Angel Muñoz Martínez.

Granada, 18 de Marzo de 1994.

P.L. GARRIDO

Fdo.: Pedro L. Garrido Galera.

Contenidos

0 Introducción. **1**

1 Modelos de no equilibrio. **6**

1.1 El modelo de Ising de equilibrio. 7

1.1.1 Definición y generalidades. 7

1.1.2 Criticalidad. 8

1.1.3 El modelo de Ising en campo medio. 9

1.2 El modelo de Ising cinético. 10

1.2.1 Clasificación de las probabilidades de transición. 11

1.3 Modelos con competición de dinámicas. 13

1.3.1 Modelo con hamiltoniano efectivo en d-dimensiones. 14

1.3.2 Aplicaciones. 15

1.4 Dependencia de los estados estacionarios en... 18

2 Ecuaciones de Fokker-Planck **20**

2.1 ¿Por qué ecuaciones de Fokker-Planck ? 21

2.2 Construcción de ecuaciones de Fokker-Planck. 24

2.2.1 Modelo discreto de partida. 24

2.2.2 Como construir una ecuación de Fokker-Planck adecuada. . . . 31

2.2.3 El método en campo medio. 38

3 Potenciales estacionarios de no equilibrio. **40**

3.1 Definición del modelo 42

3.2 Comportamiento determinista. 43

3.3 Potencial estacionario de no equilibrio. 45

3.3.1 Método de construcción de potenciales: consideraciones generales. 47

3.3.2 Método de construcción de potenciales: cálculo explícito. 53

3.3.3 Comentarios sobre el potencial V_0. 56

3.3.4 Comentarios sobre el método. 56

3.4 SOLUCIONES ESTACIONARIAS 59

3.4.1 Fokker-Planck con ruido con coeficiente de difusión constante. . 59

3.4.2 Fokker-Planck del desarrollo en Ω de van Kampen. 60

3.4.3 Fokker-Planck de Kramers-Moyal. 62
3.4.4 Fokker-Planck introducida en el capítulo 2. 63
3.5 Conclusión. 64

4 Funcionales generadores **65**
4.1 Equivalencia Langevin-Fokker-Planck 66
4.2 Integrales de camino 69
4.2.1 Ecuación de Langevin sin término cuadrático en el ruido. 70
4.2.2 Ecuación de Langevin con término cuadrático en el ruido. . . . 72
4.3 Transformaciones puntuales de variable. 74
4.3.1 Transformaciones de variable en la ecuación de Langevin. 74
4.3.2 Transformaciones de variable puntuales en la ecuación de Fokker-Planck 75
4.3.3 Transformaciones de variable puntuales en el funcional generador. 76

5 TEORIA DE CAMPOS **79**
5.1 Definición del modelo y funcional generador asociado. 80
5.1.1 Fokker-Planck y funcionales generadores. 81
5.1.2 Campos respuesta. 84
5.2 Dimensiones y límite de equilibrio. 85
5.3 Aproximación semiclásica o de punto silla. 85
5.3.1 Cálculo del potencial efectivo. 87
5.4 Desarrollos perturbativos. 90
5.4.1 Teoría libre. 90
5.4.2 Reglas de Feynman. 92
5.4.3 Límite de equilibrio. 96
5.4.4 Caso de no equilibrio. 102

Conclusiones **117**

A Consecuencias de la condición de balance detallado. **119**

B Equivalencias en integrales de camino. **120**

C Condición de potencialidad. **123**

D Resolución de una ecuación de Hamilton Jacobi. **126**

E Evaluación de integrales. **127**

F El modelo de dos temperaturas. **128**
Parámetros del modelo tipo Ginzburg-Landau. 128
El modelo de dos temperaturas en campo medio. 130
Simulación Monte Carlo. 139

Lista de Figuras

1.1 Magnetización frente a la temperatura para los modelos: bidimensional impuro de no equilibrio (linea contínua), y para el de vidrio de espines (lineas discontínuas) con distintos valores de p. 17

3.1 Estructura de los estados estacionarios deterministas. 45
3.2 Diagrama de las fases para $v_F(A)$ frente a T para $p = 0.8$. 46
3.3 Diagrama de las fases para $v_F(A)$ frente a p para diferentes temperaturas. 46
3.4 Flujo dinámico determinista para $p = 0.6$ y $T < T_c^{(2)}$. 47
3.5 Potencial estacionario exacto, solución de la ecuación maestra en el límite de bajo ruido. Se representan sólo valores positivos de los parámetros de orden. Para los valores no físicos, $v_F + v_A > 1$, representamos un potencial constante igual a 1. 57
3.6 Curvas de nivel para el potencial estacionario exacto. 57
3.7 Sección del potencial exacto con valor de $v_A = 0$. Se representan $V_0^{(1)}$, curva monótona descendente, y $V_0^{(2)}$, curva casi constante. La sección en tono gris más claro representa el mínimo de los dos valores anteriores, y define al potencial V_0. 58
3.8 En tono oscuro (claro) se marcan los valores de los parámetros de orden para los que el potencial estacionario se obtiene a partir de trayectorias que parten del estado antiferromagnético (ferromagnético). 59
3.9 Potencial estacionario asociado a la ecuación de Fokker-Planck con coeficiente de difusión constante. 61
3.10 Curvas de nivel para el potencial estacionario asociado a la ecuación de Fokker-Planck con coeficiente de difusión constante. 61
3.11 Potencial estacionario asociado a la ecuación de Fokker-Planck , de Kramers-moyal. 62
3.12 Potencial estacionario asociado a la ecuación de Fokker-Planck introducida en el segundo capítulo. 64

5.1 Diagramas de Feynman para correlaciones estaticas a dos cuerpos con un bucle y con vértices de cuatro patas. 97
5.2 Diagramas de Feynman para correlaciones estáticas a dos cuerpos con dos bucles y con vértices de cuatro y seis patas. 101

5.3 Diagramas de Feynman hasta segundo orden. 111

F.1 Curvas de magnetización para la dinámica de Glauber con $T_2 = 2$, $dJ = 1$ y diferentes valores de p 131
F.2 Curvas de magnetización para la dinámica de van Beijeren- Schulmann con $T_2 = 2$, $dJ = 1$ y diferentes valores de p 132
F.3 Curva de puntos tricríticos para la dinámica de V.B.S. 134
F.4 Curva de puntos críticos (linea contínua) para la dinámica de V.B.S., $p = 0.2$ y $dJ = 1$. Vease explicación en el texto. 135
F.5 Valores posibles de la magnetización para $T_1 = 0.25$. se observa la presencia de metaestabilidades, así como un cambio de fase de primer orden en $T_1 \approx 6.5$. 137
F.6 Perfiles del potencial para distintos valores de T_2 con $T_1 = 0.25$. 137
F.7 Valores posibles de la magnetización para $T_1 = 0.22$ fijo, y distintos valores de T_2. Se muestran las ramas estable y metaestable. 138
F.8 Perfiles del potencial para distintos valores de T_2 con $T_1 = 0.22$. 138
F.9 Curvas de magnetización frente a T_2, con $p = 0.76$.... El número entre paréntesis indica la temperatura T_1. Mvbs corresponde a la dinámica V.B.S. y M a la de Glauber. M(equil) se obtiene tomando $p = 1$. 141
F.10 Curvas de magnetización reescaladas. 141
F.11 Curvas de energía para $p = 0.76$..., en función de T_2 reescalada. 142
F.12 Curvas de susceptibilidad para $p = 0.76$... y T_2 reescalada. 142

Capítulo 0

Introducción.

La mecánica estadística trata de explicar el comportamiento y propiedades de la materia a partir de las características físicas de sus constituyentes microscópicos. El logro más destacado de esta ciencia lo constituye la teoría de las colectividades que permite conectar las físicas microscópica y macroscópica de un mismo sistema físico siempre que éste sea de naturaleza mecánica, y esté en *equilibrio termodinámico* [140, 145].
Los *sistemas aislados* siempre evolucionan en el tiempo hacia un estado estacionario único, independiente de las condiciones iniciales y, sin histéresis, que se denomina *estado de equilibrio termodinámico.* Es también posible alcanzar estados de equilibrio en sistemas no aislados, en los que se establezca un equilibrio mútuo entre el propio sistema y cada uno de los subsistemas físicos interaccionando con él. No obstante, la mayoría de los sistemas que encontramos en la naturaleza no se encuentran en equilibrio. Así, los organismos vivos, los fluidos en régimen turbulento, las estructuras organizadas espacio-temporalmente, son ejemplos de situaciones en las que existen flujos de materia, energía, u otra magnitud extensiva, entre el sistema y su entorno. Decimos en estos casos que dichos sistemas se encuentran en *estados de no equilibrio.* Si además las propiedades macroscópicas del sistema no cambian con el tiempo, se habla de *estados estacionarios de no equilibrio.* Estos, constituyen la situación más sencilla posible fuera del equilibrio, y a diferencia de sus análogos de equilibrio, no son necesariamente únicos y pueden depender fuertemente de como haya sido la evolución previa del sistema [64].
Al contrario de lo que ocurre para sistemas en equilibrio, y a pesar de los esfuerzos realizados [142, 101, 50, 95, 18, 145, 67], actualmente no existe una teoría completa, lo suficientemente general que permita el estudio de estados estacionarios fuera del equilibrio de forma sistemática. El estudio de estos estados suele abordarse utilizando técnicas *ad hoc* para cada problema concreto. En particular, estos sistemas suelen caracterizarse mediante ecuaciones dinámicas de tipo fenomenológico, que salvo excepciones son construidas mediante razonamientos heurísticos y no demostradas rigurosamente a partir de primeros principios. Así, por ejemplo, suele describirse estos sistemas mediante ecuaciones de tipo Boltzmann, Navier-Stokes, Fokker-Planck , Langevin o ecuaciones maestras [126, 177, 89, 123, 95].

Al igual que en sistemas en equilibrio, en los sistemas fuera del equilibrio pueden presentarse inestabilidades, dando lugar a patrones espacio-temporales, estructuras disipativas, autoorganización, rupturas espontáneas de simetría, oscilaciones temporales, etc, a los que de forma genérica se denomina *cambios de fase de no equilibrio* [145, 67, 112]. La variedad y complejidad de estos fenómenos cooperativos es mucho más amplia que la que se observa en sus análogos de equilibrio, y sobre todo, cualitativamente más rica para explicar la aparición de estructuras ordenadas (de baja entropía) en la naturaleza. Los cambios de fase que experimentan sistemas fuera del equilibrio son el principal objeto de estudio en esta memoria.

El nivel de comprensión de los mecanismos físicos que operan al producirse cambios de fase en estados de equilibrio, esto es, en los puntos críticos, aumentó espectacularmente tras la publicación de los trabajos de Wilson y Kadanoff [168, 169, 170, 88, 13]. La idea subyacente en estos trabajos es la siguiente: la dificultad en el estudio de los cambios de fase o fenómenos cooperativos radica en que las longitudes típicas de correlación entre los elementos que constituyen el sistema son divergentes, por lo que, en las vecindades de los puntos críticos, coexisten infinidad de escalas físicas todas ellas igualmente importantes. El hecho de no poder aislar una escala para estudiar el comportamiento de estos sistemas los hace intrínsecamente complejos. Wilson y Kadanoff propusieron el uso del *grupo de renormalización* como herramienta especialmente diseñada para analizar situaciones con muchas escalas físicas relevantes. En este contexto dado un cierto sistema en las vecindades de un punto crítico, se define una transformación de escala o *transformación de renormalización*, y se identifican los puntos fijos de dicha transformación con los puntos críticos; esto es, los puntos críticos se estudian como estados invariantes ante cambios de escala. De este modo, es posible determinar, por ejemplo, el comportamiento asintótico de las funciones termodinámicas en las vecindades de los puntos críticos, o los exponentes críticos asociados [160, 154, 88, 168].
La observación más importante desde el punto de vista teórico es que fenómenos críticos que se presentan en sistemas de naturaleza muy distinta, tienen el mismo comportamiento asintótico, y pueden caracterizarse por un mismo conjunto de exponentes críticos. Así, la mayoría de fenómenos críticos que ocurren en sistemas en equilibrio pueden clasificarse en unas pocas *familias o clases de universalidad.* Dicho de otro modo: los comportamientos críticos son insensibles a muchos de los detalles microscópicos del sistema que los experimenta, y son influenciados sólo por características globales del mismo, como son: su dimensión, simetrías, presencia de magnitudes conservadas, etc.
Las técnicas del grupo de renormalización se han utilizado con profusión en el equilibrio, para el estudio tanto de propiedades críticas estáticas [160, 154] [1] como dinámicas [22, 23, 24].
Fuera del equilibrio el panorama no es tan claro; en particular, ni la existencia ni la

[1] Citamos algunas referencias más entre las muchas que podrían mencionarse, aplicación a sistemas desordenados, [2, 110, 63]; aplicación al estudio de polímeros, [21]; aplicación a modelos de percolación, [173]; técnicas en espacio real: [117, 118, 119]; aplicación a sistemas en campo medio, [77, 78].

naturaleza de las clases de universalidad están bién fundamentadas en dicho contexto. La principal dificultad estriba en que al contrario de lo que ocurre en el equilibrio, no se dispone, en general, de un hamiltoniano ni de una función de partición que caractericen al sistema, y sobre los cuales se puedan definir transformaciones de escala. Se hace necesario, por tanto, para cada sistema particular, definir las transformaciones de escala en la ecuación dinámica que lo caracterice e iterar dichas transformaciones para obtener los puntos fijos [2]. Este procedimiento, aparte de presentar mayores problemas t cnicos, es menos general que el derivado a partir de la función de partición en el equilibrio.

Una reformulación de las ideas de Wilson, particularmente interesante desde el punto de vista teórico, se basa en la utilización de herramientas de teoría de campos combinadas con las ideas de renormalización y grupo de renormalización. La forma de argumentar es la siguiente: Supongamos un cierto sistema estadístico, definido en términos de variables microscópicas discretas, que experimenta un cambio de fase. Mediante argumentos heurísticos, o exactos en algunos casos [6, 176, 111], y reespaldados por la idea de universalidad, se define un modelo contínuo, en términos de variables *campos*, que yazca en la misma clase de universalidad que el sistema original. En lugar de analizar el modelo discreto se estudia su análogo contínuo, utilizando para ello todas las herramientas de teoría de campos, más potentes y sistemáticas, en general, que sus contrapartidas discretas. En particular, se escribe el funcional generador de las correlaciones y se hacen análisis perturbativos. De este modo se tiene una *teoría estadística de campos*, que además de ser fundamental en el estudio de fenómenos críticos constituye un nexo teórico importante con otras ramas de las física [3].

Las ideas y técnicas de la teoría estadística de campos pueden extenderse al no equilibrio en aquellas situaciones para las que pueda construirse un funcional generador de las correlaciones análogo al de equilibrio. Para ciertos sistemas de no equilibrio, caracterizados por una ecuación dinámica de tipo estocástico, es posible obtener un funcional generador. Este se construye a partir de la representación de la solución estacionaria del problema en términos de integrales de camino [176, 138, 55, 97, 9, 25]. Para tales situaciones es posible desarrollar teorías de campos y profundizar en nuestro entendimiento de los cambios de fase fuera del equilibrio [4].

Como se ha dicho anteriormente, los estados estacionarios de no equilibrio son sensibles a cómo el sistema haya evolucionado antes de llegar a ellos, esto es, dependen fuertemente de los detalles dinámicos microscópicos. De este modo, el problema de

---

[2] Véase, por ejemplo, la aplicación del grupo de renormalización de ecuaciones tipo Navier-Stokes o de Burgers, [34, 124], o a ecuaciones de Langevin, [111, 30].

[3] Véase, por ejemplo, los trabajos interdisciplinares de Parisi [138], Polyakov [143], Zinn-Justin [176], Itzykson-Drouffe [81], LeBellac [100] o Baker [8].

[4] Referencias sobre trabajos previos de aplicación de teorías de campos a sistemas fuera del equilibrio son [18] y [37].

cómo construir una ecuación dinámica en términos de variables campos, para sistemas capaces de alcanzar este tipo de estados, no es trivial y habrá de ser tratado cuidadosamente para no obviar posibles influencias relevantes en el punto crítico.

El esquema que seguimos en esta memoria es el siguiente:

- En el primer capítulo se introduce la clase de modelos de no equilibrio que serán objeto de estudio a lo largo de todo el trabajo. Se trata de modelos reticulares, matemáticamente bien definidos, herederos del conocido modelo de Ising cinético. Se definen a través de una ecuación maestra en la que la competición estocástica entre diferentes mecanismos dinámicos en conflicto, hace que el sistema alcance estados estacionarios de no equilibrio. En particular, veremos, en un ejemplo exactamente resoluble, la fuerte dependencia de estos estados en los detalles de la dinámica microscópica.

- En el segundo capítulo abordamos el problema de cómo representar esta clase de modelos mediantes ecuaciones mesoscópicas, escritas en términos de variables campo, contínuas. En particular, desarrollamos un nuevo método para construir una ecuación de Fokker-Planck a partir de una ecuación maestra dada, respetando la dependencia original en la dinámica microscópica.

- En el tercer capítulo hacemos un test para el método desarrollado en el capítulo anterior. Para ello abordamos el problema de la construcción de potenciales de no equilibrio, análogos a los potenciales termodinámicos de equilibrio. Estos potenciales, como era ya sabido anteriormente resultan ser no diferenciables en general.

- En el cuarto capítulo obtenemos representaciones en términos de integrales de camino para una ecuación de Fokker-Planck genérica. El desarrollo se hace de forma explícita y cuidadosa para aclarar las controversias existentes entre las distintas representaciones previamente consideradas en la literatura. En particular, veremos como algunas de las más frecuentemente utilizadas resultan ser incorrectas.

- En el quinto capítulo se aplica el método desarrollado a un modelo particular: el modelo con dos temperaturas. Caracterizamos este modelo, definido a través de una ecuación maestra, mediante una ecuación de Fokker-Planck , obtenemos su lagrangiano asociado y desarrollamos una teoría perturbativa para el mismo. Renormalizando la teoría y resolviendo la ecuación de grupo de renormalización asociada obtenemos los exponentes críticos del modelo. El resultado final es que el modelo yace en la misma clase de universalidad que el modelo de Ising de equilibrio, resultado éste, predicho también por otros autores [61].

- Por último presentamos las conclusiones, comentarios críticos y posibles extensiones y aplicaciones del método.

Algunas de las contribuciones originales de este trabajo aparecen también en los siguientes artículos,

- M. A. Muñoz and P. L. Garrido, *On the influence of microscopic dynamic in non-equilibrium stationary states: a mean field example*, Jour. Phys. **A26**, 3909, (1993).
- M. A. Muñoz and P. L. Garrido, *Ising model with two temperatures: simulation and theory*, in II Granada Seminar in Computational Physics, Eds, P. L. Garrido and J. Marro, p.326, World Scientific, 1993.
- P. L. Garrido and M. A. Muñoz, *Nonequilibrium lattice models: A case with effective hamiltonian in d-dimensions*, Phys. Rev. **E48**, R4153, (1993).
- P. L. Garrido and M. A. Muñoz, *Continuum description for nonequilibrium competing dynamic models*, submitted to Phys. Rev. Lett.
- M. A. Muñoz and P. L. Garrido, *A Fokker-Planck equation for nonequilibrium competing dynamic models*, submitted to Phys. Rev.
- M. A. Muñoz and P. L. Garrido, *A test for two Fokker-Planck modelings of a master equation.* Preprint.

Capítulo 1

Modelos de no equilibrio.

Dar una descripción detallada y completa de un sistema físico macroscópico es una tarea difícil en general. Dicha dificultad se incrementa en las vecindades de puntos críticos, donde coexisten fenómenos a muy diversas escalas [168], y aparecen longitudes de correlación divergentes, y fenómenos cooperativos. Para estudiar criticalidad resulta, por tanto, necesario definir versiones simplificadas tanto en su estructura geométrica, como en las leyes físicas que los rigen de los sistemas físicos reales. Estos modelos, matemáticamente bien definidos permiten obtener información física relevante de problemas que de otro modo serían intratables. Han de contener las características esenciales del sistema en cuestión y excluir aquellos elementos que se supongan irrelevantes.

Nuestro trabajo en esta memoria es de índole esencialmente teórica, por lo que directamente presentaremos los modelos sobre los que vamos a trabajar sin entrar en una discusión pormenorizada de su conexión con sistemas físicos "reales".

En cualquier caso, la mayoría de los modelos que se estudian en el contexto de la física estadística, y en particular en teoría de fenómenos críticos como, por ejemplo, el modelo de Ising, el de Potts, o los modelos de de percolación, entre otros muchos, [154, 13, 138] son modelos altamente simplificados y muchos de ellos claramente no-físicos. Son interesantes en cuanto que clarifican el comportamiento de otros modelos más realistas y parecen capturar la esencia de lo que ocurre en los sistemas físicos reales con cambios de fase continuos o de segundo orden.

Nuestro objetivo en este capítulo consiste en definir los modelos de no-equilibrio que serán el objeto principal de nuestra atención a lo largo de esta memoria. En particular, introduciremos los modelos con competición de dinámicas. Puesto que dichos modelos serán modificaciones más o menos elaboradas del arquetípico modelo de Ising de equilibrio, comenzaremos por definir dicho modelo en sus versiones tanto estática como dinámica o cinética.

1.1 El modelo de Ising de equilibrio.

1.1.1 Definición y generalidades.

El modelo de Ising, amplísimamente tratado en la bibliografía [10, 13, 154, 160, 140, 65, 120, 157], fue propuesto en 1925 por Lenz a Ising [102, 79] como un modelo simple de un material ferromagnético. Desde entonces, se ha convertido en un modelo muy utilizado para el estudio de sistemas de muy distinta naturaleza [160, 154] que presentan un cambio de fase contínuo [1].
Sea una red d-dimensional cúbica simple, Λ, con parámetro de red a, y Ω nudos. Sobre cada uno de los nudos de dicha red $\underline{x} \in \Lambda$ se define una variable de espín $s_{\underline{x}}$ que puede tomar dos valores distintos $+1/2$ y $-1/2$ (o bien $+1$ y -1). Una configuración, $\underline{s}$, es un conjunto de valores de las variables de espín, $\underline{s} = \{s_{\underline{x}},\ \underline{x} \in \Lambda\}$. El hamiltoniano de interacción que define al modelo es:

$$H_{Ising}(\underline{s}; \underline{J}, \underline{h}) = -\frac{1}{2} \sum_{\underline{x},\underline{y} \in \Lambda} J_{\underline{x}\underline{y}} s_{\underline{x}} s_{\underline{y}} - \sum_{\underline{x} \in \Lambda} h_{\underline{x}} s_{\underline{x}}. \tag{1.1}$$

donde el primer término da cuenta de la interacción entre espines mientras que el segundo representa la interacción con un campo magnético externo. Salvo que especifiquemos lo contrario se considerará $J_{\underline{x}\underline{y}} = J$ para $\underline{x}, \underline{y}$ tales que $|\underline{x} - \underline{y}| = a$, y $J_{\underline{x}\underline{y}} = 0$ en otro caso, [2] y $h_{\underline{x}} = h$, esto es, campos externos homogéneos espacialmente. Para valores de $J > 0$ las configuraciones en que hay un predominio de espines próximos con iguales orientaciones se ven favorecidas energéticamente respecto a aquellas en que predominan las alternancias de espines. Así, valores positivos de J definen un hamiltoniano de tipo ferromagnético. Por el contrario, si $J < 0$ se favorecen las configuraciones de espines alternados, y el hamiltoniano se dice antiferromagnético.

Este sistema hamiltoniano, se considera en presencia de un baño térmico, a una cierta temperatura T, con el que está en equilibrio termodinámico.
El estado estacionario del sistema viene dado por una medida de Gibbs

$$P_{est}(\underline{s}; J) \propto \exp\left[-\beta H_{Ising}(\underline{s}; J)\right] \tag{1.2}$$

siendo β la inversa de la temperatura [3], y todas propiedades macroscópicas se pueden

[1] Aquí describiremos el modelo utilizando la terminología de los sistemas magnéticos, siendo, en cualquier caso posible reinterpretarlo de forma sencilla como un gas reticular, o un modelo para mezclas binarias [154, 112].

[2] La forma funcional de este término se deriva del principio de exclusión de Pauli, y es un efecto puramente cuántico. Puede asociarse a la interacción de intercambio entre las funciones de onda de los espines. La interacción directa suele ser demasiado débil como para dar cuenta del ferromagnetismo, mientras que la de intercambio es más intensa, aunque decae rápidamente con la distancia. Este decaimiento rápido justifica el trabajar únicamente con interacciones entre vecinos próximos [65, 157, 154].

[3] A lo largo de todo el trabajo consideraremos un sistema de unidades en el que la constante de Boltzmann se fija igual a uno.

estudiar en el marco de la teoría de las colectividades de Gibbs.
La magnetización total del sistema, M, definida por

$$M = \sum_{i \in \Lambda} s_{\underline{x}}. \tag{1.3}$$

caracteriza el grado de orden o desorden del sistema a cada temperatura. Así, a altas temperaturas el sistema está siempre desordenado, en el sentido de que no hay una orientación predominante de los espines, y en promedio $M = 0$. Valores no nulos de M caracterizan macroestados en los que se ha producido una *ruptura espontánea de simetría* y presentan cierto ordenamiento magnético. En este sentido, se denomina a M *parámetro de orden* natural de este modelo.

1.1.2 Criticalidad.

Es un hecho conocido, que gracias a la *universalidad* de los fenómenos críticos, sistemas de naturaleza muy distinta presentan el mismo tipo de divergencias o singularidades en las vecindades de sus puntos críticos. De este modo, la gran mayoría de los fenómenos críticos conocidos, pueden clasificarse en unas pocas familias, o *clases de universalidad* [4]. La principal virtud del modelo de Ising, que lo hace tan útil en el contexto de la teoría de fenómenos críticos y cambios de fase, es que es un modelo particularmente sencillo, que se toma como representante canónico de una vasta clase de universalidad. De hecho, a ésta suele denominarse clase de universalidad del modelo de Ising y a ella pertenecen fenómenos tan distintos como transiciones ferromagnéticas, antiferromagnéticas, separaciones de fase, transiciones líquido-gas, superfluidez, superconductividad, o, por ejemplo, la transición de alta temperatura en las primeras etapas del universo [13, 154, 160, 162]. Históricamente, además, fue uno de los primeros sistemas sobre el que se aplicaron las ideas de renormalización y grupo de renormalización [88, 168, 13], que conducen de forma natural al concepto de universalidad, y que se han mostrado sumamente eficaces en distintas áreas de la física teórica [176, 6, 100, 138, 81].

Una peculiaridad del estudio de fenómenos críticos es que la dimensión del sistema que se esté considerando es un parámetro esencial. Así, el comportamiento del modelo de Ising varía radicalmente con d:

- Para dimensión espacial $d = 1$ el sistema no presenta ruptura espontánea de simetría, esto es, no hay *cambio de fase.*
- Para $d = 2$ el modelo fue resuelto de forma exacta por Onsager en ausencia de campo magnético [136, 120]. Se tiene una temperatura crítica no nula y, por tanto, un cambio de fase ferromagnético. Los exponentes críticos resultan ser diferentes

[4] Nos referimos únicamente a los cambios de fase contínuos.

de los predichos por la teoría de Landau (de campo medio) [96], que se suponía aplicable a este sistema antes de conocerse la solución de Onsager.
En $d = 2$ y en presencia de campo, el modelo no ha sido aún resuelto.

- Para $d = 3$ se conoce también tanto la temperatura como los exponentes críticos, pero sólo por métodos aproximados [5], puesto que hasta ahora, y a pesar de los esfuerzos invertidos, aún no ha podido ser resuelto de forma exacta [160, 154, 6].

- Por encima de $d = 4$ se espera que si el modelo presenta cambios de fase estos sean de tipo campo medio [6, 176].

1.1.3 El modelo de Ising en campo medio.

La aproximación de campo medio puede formularse desde distintas perspectivas, y es en muchos casos la aproximación más sencilla para caracterizar fenómenos críticos, aunque no siempre con resultados satisfactorios. Puede construirse como suma parcial de un desarrollo a altas temperaturas, mediante métodos variacionales, o como el término dominante al aplicar una aproximación de punto silla al funcional generador asociado [138, 140, 154, 176].
Pero, independientemente de cómo se defina, la idea física subyacente bajo la aproximación de campo medio para el modelo de Ising consiste en suponer que dada una configuración, el estado de un espín viene determinado por el grado de ordenamiento del sistema globalmente, despreciándose, por completo, las fluctuaciones respecto a dicho estado global promediado. Así, suponiendo que cada espín interacciona con el promedio de los restantes, se tiene (en ausencia de campo magnético):

$$H_{Icm}(\underline{s};\underline{J},\underline{h}) = -\frac{1}{2}J\sum_{\underline{x},\underline{y}\in\Lambda} s_{\underline{x}}\left(\frac{M}{\Omega}\right) = -\frac{1}{2}dJ\frac{M}{\Omega}\sum_{\underline{x}\in\Lambda} s_{\underline{x}} \tag{1.4}$$

donde aparece la dimensión espacial d a partir del número de vecinos próximos. A partir de (1.4), es directo obtener la siguiente ecuación de autoconsistencia [140, 154]:

$$m(\beta) = \tanh(d\beta Jm) \tag{1.5}$$

siendo $m = M/\Omega$. Esta ecuación trascendente tiene solución no trivial por debajo de la temperatura crítica $\beta_c = 1/dJ$. Nótese que en esta aproximación la dimensión únicamente aparece reescalando los acoplamientos J, y existe una solución no trivial de (1.5), esto es, un cambio de fase, independientemente del valor de d. Los exponentes críticos asociados a este cambio de fase pertenecen a una clase de universalidad que se denomina *clásica*. Puede demostrarse que el modelo de Ising, en dimensiones superiores a $d_c = 4$ yace en esta clase de universalidad [6, 176, 138].

[5] Desarrollos a altas temperaturas, principalmente.

1.2 El modelo de Ising cinético.

El modelo de Ising es un modelo puramente configuracional o estático, en el sentido de que sólo determina la distribución de probabilidad de las distintas configuraciones en el estado de equilibrio [6]. De hecho, en el hamiltoniano de Ising no aparecen variables conjugadas de los espines (términos cinéticos) que serían las responsables de la evolución de los mismos en las ecuaciones de Hamilton asociadas.
Si, en el estudio de materiales magnéticos, se desea analizar algún tipo de mecanismo cinético o dinámico, es necesario extender el modelo de Ising de algún modo.
Consideremos, que el sistema que se desea estudiar está en contacto con un baño térmico a una cierta temperatura T. Dicho baño térmico está constituido por grados de libertad diferentes de los considerados hasta ahora [7]. La interacción de los espines con el baño térmico es la responsable de la evolución de los mismos en nuestros modelos dinámicos.

La forma propuesta por Glauber [51] de tratar la dinámica inducida por la interacción con el baño térmico, es suponerla estocástica y markoviana, e implementarla en el modelo de partida mediante una ecuación maestra, de la siguiente forma

$$\frac{dP(\underline{s},t)}{dt} = \sum_{\underline{s}'} [w(\underline{s}' \rightarrow \underline{s}; \underline{K})P(\underline{s}',t) - w(\underline{s} \rightarrow \underline{s}'; \underline{K})P(\underline{s},t)] \qquad (1.6)$$

donde P(s,t) representa la probabilidad de encontrar al sistema en una configuración $\underline{s}$ en un instante de tiempo t, y $w(\underline{s} \rightarrow \underline{s}'; \underline{K})$ es la probabilidad por unidad de tiempo de que, dada la configuración $\underline{s}$, se produzca una cambio estocástico que lleve al sistema a una nueva configuración $\underline{s}'$. Dicha probabilidad depende los parámetros J, h y β, que representamos genéricamente como $\underline{K}$.
A este modelo, así definido, se le denomina modelo de Ising cinético [8]. A partir de esta ecuación es posible deducir, sin mas que multiplicar por las variables de espín y sumar sobre todas las posibles configuraciones, todas las ecuaciones que rigen el comportamiento de las correlaciones del sistema. A partir de este modelo es posible estudiar tanto la relajación del sistema desde una distribución arbitraria hacia el estado de equilibrio, como procesos dinámicos en el equilibrio [9].

---

[6] Una característica del modelo de Ising es que no requiere un tratamiento mecanocuántico, puesto que si sustituimos en (1.1) las variables de espin por operadores de un espacio de Hilbert, y la función hamiltoniano por su operador análogo, los operadores de espín commutarán con el hamiltoniano, siendo por tanto constantes en el tiempo. Así, la versión cuántica del modelo se reduce de forma directa a la clásica, al ser el operador hamiltoniano diagonal en la base propia de los operadores de espín.

[7] Por ejemplo, si se pretende describir un retículo real habrá que considerar, de algún modo, las oscilaciones de red. El gas de fonones asociado a la cuantificación de las oscilaciones presenta una alta capacidad calorífica, por lo que puede ser considerado como un baño térmico a temperatura constante. Otros grados de libertad a considerar podrían ser las *ondas de espín*, o la presencia de impurezas o vacantes en la red.

[8] En lo sucesivo, sin detenernos en sutilezas semánticas, llamaremos a este modelo cinético o dinámico indistintamente.

[9] Como, por ejemplo, correlaciones temporales estacionarias.

Llamaremos estado estacionario a una función $P_{est}(\underline{s})$ tal que sea solución de la ecuación (1.6) igualada a cero. Es importante notar que el hecho de tener una distribución estacionaria, no implica que ninguna configuración particular de espines sea también estacionaria. Esto es, los espines evolucionan en cualquier caso independientemente de que la función de distribución sea estacionaria o no.
Las probilidades de transición en (1.6) se pueden construir del siguiente modo

$$w(\underline{s} \rightarrow \underline{s}'; \underline{K}) = D[\beta H_{Ising}(\underline{s}') - \beta H_{Ising}(\underline{s})] \tag{1.7}$$

donde la función D cumple las propiedades,

$$\begin{aligned} D[\lambda] &= \exp(-\lambda) D[-\lambda] \\ D[0] &= 1 \end{aligned} \tag{1.8}$$

y dependen de los estados inicial y final únicamente a través de la diferencia de energía entre ambos estados. Es directo comprobar, sin más que sustituir (1.7) y (1.8) en (1.6), que la solución estacionaria del sistema viene dada por, (1.2) y es por tanto un estado de equilibrio [10].
Nótese, que gracias a la forma en que hemos definido las probabilidades de transición, cada uno de los sumandos de la ecuación (1.6) se anula por separado. A esta propiedad se le denomina *balance detallado.* En aquellos sistemas para los que se cumple una condición de este tipo, es directo calcular la probabilidad estacionaria, tal y como hemos hecho aquí. Cuando no se tiene balance detallado, como ocurre en general para sistemas fuera del equilibrio, la obtención de la solución estacionaria se hace mucho más complicada como veremos.
Antes de concluir esta sección queremos resaltar el hecho de que aunque hemos definido la ecuación maestra (1.6) para el hamiltoniano de Ising, el método considerado es mucho más general y extensible de forma directa a otros hamiltonianos.

1.2.1 Clasificación de las probabilidades de transición.

El modelo no quedará completamente definido, hasta que no especifiquemos cual es la forma concreta de las probabilidades de transición. Para ello hemos de establecer:

- cual es la forma de las configuraciones $\underline{s}'$ a las que se tiene probabilidad no nula de "saltar" estando en $\underline{s}$.
- cual es la forma funcional de $D[\lambda]$ respetando las propiedades (1.8).

Vamos a clasificar las probabilidades de transición atendiendo a cómo resolvamos los dos puntos anteriores.

[10] La distribución estacionaria que hemos encontrado es además única, pues se cumplen las hipótesis, muy generales, que garantizan la existencia y unicidad de la solución de una ecuación maestra en el límite $t \rightarrow \infty$, partiendo de casi cualquier distribución inicial dada [101].

Clasificación de las probabilidades de transición atendiendo a el tipo de proceso considerado.

En general, cualquier transición de una configuración $\underline{s}$ a una $\underline{s}'$, supone la inversión de un cierto número de espines. En particular, lo más usual es restringirse a procesos locales en los que $\underline{s}$ y $\underline{s}'$ se diferencian en el valor de pocos espines, siendo éstos además próximos entre si. En particular, suele considerarse:

- *Procesos de inversión de un espín [51].*
  En este caso la ecuación maestra (1.6) se reduce a:

$$\frac{dP(\underline{s},t)}{dt} = \sum_{\underline{x}} [w(\underline{s}^{\underline{x}} \rightarrow \underline{s}; \underline{K})P(\underline{s}^{\underline{x}},t) - w(\underline{s} \rightarrow \underline{s}^{\underline{x}}; \underline{K})P(\underline{s},t)] \qquad (1.9)$$

  donde $\underline{s}^{\underline{x}}$ es una configuración de espines que coincide con $\underline{s}$ en todos los puntos, salvo en $\underline{x}$, donde $\underline{s}_{\underline{x}}^{undx} = -\underline{s}_{\underline{x}}$. Este proceso se denomina de tipo *no conservado*, haciendo referencia al hecho de que el parámetro de orden, esto es, la magnetización, varía en cada inversión de un espín.

- *Procesos de intercambio de espines [91].*
  La ecuación maestra (1.6) es

$$\frac{dP(\underline{s},t)}{dt} = \sum_{\underline{x}} \sum_{\underline{y}/|\underline{x}-\underline{y}|=a} [w(\underline{s}^{\underline{xy}} \rightarrow \underline{s}; \underline{K})P(\underline{s}^{\underline{xy}},t) - w(\underline{s} \rightarrow \underline{s}^{\underline{xy}}; \underline{K})P(\underline{s},t)] \qquad (1.10)$$

  siendo $\underline{s}^{\underline{xy}}$ la configuración $\underline{s}$ con los espines en los nudos vecinos próximos $\underline{x}$ e $\underline{y}$ intercambiados entre si. A este tipo de proceso se le denomina de tipo *conservado*, pues al intercambiar variables de espín la magnetización se mantiene constante, y resulta útil para estudiar procesos de difusión.

A veces se consideran también, en la literatura, procesos con inversiones o intercambios múltiples de espín, aunque en general, la complejidad adicional de cálculo que éstos llevan consigo no se traduce en la obtención de resultados esencialmente distintos.

Clasificación de las probabilidades de transición atendiendo a la forma funcional de $D[\lambda]$.

Fijado el tipo de proceso que se desea considerar, queda aún una cierta libertad para elegir la función $D[\lambda]$ que satisfaciendo las propiedades (1.8) define a las probabilidades de transición. El número de posibles realizaciones para esta función es ilimitado, algunas de las formas más comunmente usadas en la bibliografía son:

$$D[\lambda] = 1 - \tanh[\lambda/2] \qquad (1.11)$$

$$D[\lambda] = \min\{1, \exp[\lambda]\} \qquad (1.12)$$

$$D[\lambda] = \exp[-\lambda/2] \qquad (1.13)$$

La primera de ellas es una extensión para dimensiones arbitrarias de la utilizada originalmente por Glauber [51](la llamaremos en lo sucesivo *dinámica de Glauber*). La segunda tiene especial interés para simulaciones tipo MonteCarlo o de dinámica molecular, y fue introducida por Metropolis et al. [125] (*dinámica de Metropolis*). La tercera es de uso menos común y fue propuesta por van Beijeren y Schulman [11] (*dinámica V.B.S.*). Es un propiedad notoria, que independientemente del tipo de probabilidades de transición que se considere, satisfaciendo (1.8), el estado estacionario de equilibrio, es siempre el mismo: dado por (1.2). Así pues, sólo propiedades dinámicas como, por ejemplo, tiempos de relajación, dependen de la función considerada, pero en ningún caso las propiedades estáticas del estado estacionario.

1.3 Modelos con competición de dinámicas.

Los sistemas de no-equilibrio son ubícuos en la naturaleza, y se presentan bajo muy diversas condiciones y en sistemas muy diferentes entre sí. Igualmente los modelos para describir situaciones de no equilibrio son de naturaleza muy variada, y dependen de cuál sea el contexto en el que se trabaje o de que tipo de propiedades se desee estudiar. Una familia particular de modelos de no equilibrio es la que vamos a considerar en esta tesis, y que denominaremos *modelos de competición de dinámicas*. En estos modelos, la presencia de algún agente externo que impide al sistema alcanzar un estado de equilibrio se simula mediante la presencia de diferentes mecanismos dinámicos en conflicto. Para definir este tipo de modelos nos apoyaremos en el modelo dinámico de Ising definido en el apartado anterior, y después veremos como extender estas ideas a otros casos, con más generalidad.

Consideremos las siguientes probabilidades de transición,

$$W_f(\underline{s} \to \underline{s}') = \int d\underline{K}' f(\underline{K}') w(\underline{s} \to \underline{s}'; \underline{K}'). \tag{1.14}$$

donde $w(\underline{s} \to \underline{s}'; \underline{K})$ cumple la propiedad de balance detallado para cada conjunto de valores de los parámetros, $\underline{K}$. La función $f(\underline{K})$ es una función de distribución de probabilidad; nótese que si $f(\underline{K}') = \delta(\underline{K} - \underline{K}')$ entonces $W_f(\underline{s} \to \underline{s}') = w(\underline{s} \to \underline{s}'; \underline{K})$ y se recupera el modelo de equilibrio. Hemos definido, por tanto, unas nuevas probabilidades de transición, como la superposición, o competición estocástica, de diferentes probabilidades de transición de equilibrio, cada una de las cuales satisface una condición de balance detallado respecto a una distribución estacionaria diferente, caracterizada por distintos valores de $\underline{K}$. Dicho de otro modo, en lugar de considerar un único mecanismo dinámico, se considera un conjunto de ellos en competición, cada uno de los cuales, actuando en solitario, llevaría al sistema a un estado estacionario diferente. Al competir varios, se establece un tipo de *frustración dinámica* entre las distintas tendencias, cuya consecuencia es, usualmente, llevar al sistema a un estado estacionario de distinta naturaleza que los estados de equilibrio termodinámico: un *estado estacionario de no*

equilibrio.
En general, unas probabilidades de transición como las que acabamos de definir (1.14) no satisfacen una condición de balance detallado respecto a ningún *hamiltoniano efectivo*, razonable, esto es, no es posible definir una función $H_{eff}(\underline{s})$, tal que

$$\frac{W_f(\underline{s} \to \underline{s}')}{W_f(\underline{s}' \to \underline{s})} = \exp[H_{eff}(\underline{s}) - H_{eff}(\underline{s}')] \tag{1.15}$$

sin involucrar interacciones entre espines arbitrariamente distantes [109, 42]. De este modo, la solución estacionaria de estos modelos no será expresable como una medida de Gibbs respecto a un cierto hamiltoniano. Por esta razón, a esta familia de modelos, se les denomina de forma genérica, modelos de Ising de no-equilibrio.
No obstante, se han encontrado algunos sistemas unidimensionales particulares, definidos mediante la competición de diferentes dinámicas de equilibrio, para los que si es posible encontrar un tal hamiltoniano efectivo, y para los que, por lo tanto, se cumple una condición de balance detallado. Estos sistemas se comportan como sistemas de equilibrio pero con parámetros efectivos dependientes de los parámetros originales del modelo [42]. Queremos resaltar el hecho de que estos casos son excepcionales, y que en la inmensa mayoría de los modelos con competición de dinámicas esto no es posible.

Para aclarar los conceptos que acabamos de introducir, vamos a estudiar a continuación una familia de modelos con competición de dinámicas, para la que somos capaces de encontrar un hamiltoniano efectivo, y por tanto la solución estacionaria del mismo de forma relativamente simple. A través de este ejemplo, veremos la peculiaridad del mismo, y la imposibilidad de extender el método para hallar el estado estacionario en otros modelos análogos de no equilibrio. Se trata además del único ejemplo que conocemos, con más de una variable, para el que es posible construir un hamiltoniano efectivo independientemente de la dimensión.

1.3.1 Modelo con hamiltoniano efectivo en d-dimensiones.

Sea un modelo reticular con la estructura geométrica del modelo de Ising, en d-dimensiones. Consideremos una ecuación maestra markoviano del tipo (1.6) para procesos de inversión de un espín, con competición de dinámicas, esto es,

$$\frac{dP(\underline{s},t)}{dt} = \sum_{x \in \Lambda} [W_f(\underline{s}^x \to \underline{s}) P(\underline{s}^x, t) - W_f(\underline{s} \to \underline{s}^x) P(\underline{s}, t)] \tag{1.16}$$

siendo

$$\begin{aligned} W_f(\underline{s} \to \underline{s}^i) &= << \exp[-\beta \Delta_{\underline{x}} H_{Ising}(\underline{s}, \underline{K}')] >> \\ &\equiv \int d\underline{K}' f(\underline{K}') \exp[-\beta \Delta H_{Ising}(\underline{s}, \underline{K}')] \end{aligned} \tag{1.17}$$

donde

$$\Delta_{\underline{x}} H_{Ising}(\underline{s}; \underline{K}) = H_{Ising}(\underline{s}^x; \underline{K}) - H_{Ising}(\underline{s}; \underline{K}) \tag{1.18}$$

Esto corresponde a una superposición de dinámicas del tipo (1.13). Ahora $\underline{K}$ representa sólo a J, pues consideramos $h = 0$ y β fija para las distintas dinámicas simples. El estado estacionario de este sistema viene descrito por un hamiltoniano de Ising con constante de acoplamiento efectiva. Esta afirmación puede demostrarse fácilmente mediante la observación de que las probabilidades de transición definidas em (1.17) pueden escribirse como

$$W_f(\underline{s} \to \underline{s}^{\underline{x}}) = N^{2d} \exp\left(\frac{-\beta \Delta_{\underline{x}} H_{Ising}(\underline{s}; J)}{2}\right) \tag{1.19}$$

con

$$N^2 = \frac{<< \sinh(\beta J) >><< \cosh(\beta J) >>}{\sinh(\beta J') \cosh(\beta J')} \tag{1.20}$$

y

$$J' = \frac{1}{2\beta} \log\left[\frac{<< \exp(\beta J) >>}{<< \exp(-\beta J) >>}\right] \tag{1.21}$$

Estas probabilidades de transición satisfacen explícitamente la condición de balance detallado (1.7) respecto a la distribución estacionaria (1.2), sustituyendo J por J'. Es interesante destacar el hecho de que para este tipo de hamiltonianos efectivos, la dependencia de sus parámetros en la temperatura, hace que algunas propiedades usuales de sistemas de equilibrio hayan de ser reformuladas. En particular, si para el modelo anterior se calcula el calor específico es directo comprobar que no es proporcional a las fluctuaciones de la energía como predice la relación de *fluctuación disipación* [140, 145] en su forma usual, sino que aparece un sumando adicional proviniente de las derivadas de J' respecto a la temperatura. Esto no quiere decir que no se cumpla el teorema de fluctuación disipación, sino que el enunciado de este ha de ser reformulado.

Recalcamos también el hecho de que la existencia de un hamiltoniano efectivo es una propiedad peculiar de la dinámica que hemos considerado, superposición de dinámicas de tipo exponencial (1.13) y que se deriva esencialmente de las propiedades de la función exponencial. Para cualquier otra elección de la función $D[\lambda]$ no hemos sido capaces de mapear el sistema en otro de equilibrio con parámetros efectivos.

Importante:
A lo largo de toda esta sección el papel del hamiltoniano de Ising, no es esencial, pudiendo ser desempeñado por otros hamiltonianos distintos, sin que se modifique esencialmente el desarrollo. De hecho, en [44] se presenta este mismo cálculo en función de un hamiltoniano más general.

1.3.2 Aplicaciones.

Algunos sistemas interesantes que aparecen en la bibliografía pueden ser tratados de forma sencilla haciendo uso del resultado que acabamos de obtener. Exponemos a con-

tinuación algunos modelos y los resultados que para ellos obtenemos [44]. De este modo nos familiarizaremos con este tipo de modelos de no equilibrio mostrando en estos casos exactamente resolubles el tipo de comportamientos no triviales que aparecen en los sistemas con competición de dinámicas. Para cada realización particular de la función $f(J)$ definida en (1.14), tendremos un modelo distinto, lo que nos permite presentar resultados para diferentes tipos de situaciones físicas.

1. **Modelo de Ising impuro de no equilibrio:**

$$f(J) = p\delta(J - J_0) + (1 - p)\delta(J), \quad 0 \leq p \leq 1. \tag{1.22}$$

Este modelo introducido en [43], simula la presencia de impurezas no magnéticas cuya distribución cambia con el tiempo, en un modelo de Ising. En este caso, la constante de acoplamiento efectiva, obtenida a partir de (1.21) y (1.22), es

$$J'(\beta) = \frac{1}{2\beta} \log \left[\frac{p \exp(\beta J_0) + 1 - p}{p \exp(-\beta J_0) + 1 - p} \right]. \tag{1.23}$$

En particular, $J'(\beta) = J_0/2$ cuando $p = 1/2$, y $J'(\beta) \to J_0/2$, y pJ_0, cuando $\beta^{-1} \to 0$, e ∞, respectivamente. Por lo tanto, para $d = 1$ no hay cambio de fase, el punto crítico está a temperetura cero, y todos los exponentes críticos térmicos coinciden con los correpondientes del modelo de Ising de equilibrio divididos entre 2. Para $d \geq 2$ hay un cambio de fase independientemente del valor de p, con exponentes críticos en la clase de universalidad del modelo de Ising. La magnetización del sistema satura a 1 ó a -1 cuando la temperatura es nula. En particular, cuando $p = 3/4$ las temperaturas críticas vienen dadas por $\beta_c J_0 = 0.5918...$ y $0.2960...$ para $d = 2$ y $d = 3$ respectivamente.

2. **Modelo de vidrio de espín de no equilibrio:**

$$f(J) = p\,\delta(J - J_0) + (1 - p)\,\delta(J + J_0), \quad 0 \leq p \leq 1. \tag{1.24}$$

Este modelo fue estudiado en [45, 4] con objeto de analizar la difusión de enlaces antiferromagnéticos en un modelo de *vidrio de espines* tipo Ising. La constante efectiva de acoplamiento es ahora

$$J'(\beta) = \frac{1}{2\beta} \log \left[\frac{p \exp(2\beta J_0) + 1 - p}{(1 - p) \exp(2\beta J_0) + p} \right] \tag{1.25}$$

En contraste con el caso anterior, para $d = 1$ y $0 < p < 1$ no existe un punto crítico a temperatura cero. Para $d \geq 2$ existe un punto crítico tipo Ising siempre que

$$p > p_c(d) \equiv \frac{1}{1 + \exp(-2\beta_c{}^{(d)} J_0)} \tag{1.26}$$

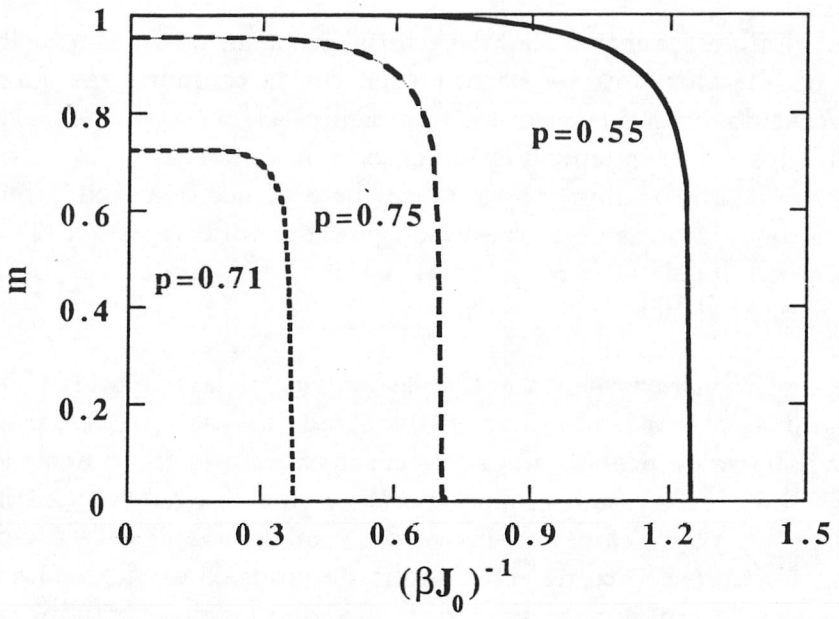


Figura 1.1: Magnetización frente a la temperatura para los modelos: bidimensional impuro de no equilibrio (linea contínua), y para el de vidrio de espines (lineas discontínuas) con distintos valores de p.

o bien $p < (1 - p_c(d))$, siendo $1/\beta_c{}^{(d)}$ la temperatura crítica para el modelo de Ising en d dimensiones. En particular, $p_c(2) = 1/\sqrt{(2)} = 0.7071...$ y $p_c(3) = 0.6090....$ En este caso, en contraste con el modelo anterior, la magnetización no satura a temperatura cero.
Cuando $1 - p_c(d) < p < p_c(d)$ no hay transición de fase. En la figura 1, se muestra el comportamiento de la magnetización para distintos valores de p y dimensión $d = 2$.

3. *Modelo con distribución de enlaces dependiente de la temperatura:*

$$f(J) = N \exp\left[-\alpha\left(J - \frac{\beta}{2\alpha}\right)^2\right], \qquad \alpha = \alpha(\beta). \tag{1.27}$$

Al igual que ocurre en los *modelos annealed* [161], puede suponerse que los enlaces J interactúan de algún modo con el baño térmico y, por lo tanto, su distribución puede depender de la temperatura. Como un ejemplo particular, hemos considerado la distribución gaussiana dependiente de la temperatura anterior (1.27), con

$$\alpha = \left(\frac{\beta^2}{2\beta_b{}^{(d)}}\right)\left(1 + c\left|\frac{1}{\beta} - 1\right|^{\gamma}\right) \tag{1.28}$$

siendo c y γ constantes positicas. En particular, si $1 < \gamma < 2$, tanto el valor medio, como la desviación típica tienden a infinito (cero) cuando β tiende a cero

(infinito). Esto es, la intensidad característica de los enlaces, y las fluctuaciones en torno a dicho valor característico, crecen con la temperatura. Para esta elección la temperatura crítica es 1, y los exponentes críticos coinciden con los de Ising multiplicados por γ independientemente de la dimensión.
Este ejemplo, aún siendo un tanto artificioso, nos sirve para mostrar como la presencia de dinámicas en competición puede modificar, no ya el comportamiento macroscópico del sistema respecto al sistema análogo de equilibrio, sino también los exponentes críticos.

En conclusión, contrariamente a lo que ocurre en la mayoría de los modelos de Ising con dinámicas compitiendo, hemos encontrado un caso particular en el que la distribución estacionario de probabilidad puede ser expresada como una medida de Gibbs con respecto a un cierto hamiltoniano efectivo, tipo Ising, con parámetros efectivos dependientes de los parámetros originales del modelo. Debido a esta dependencia, el comportamiento macroscópico de esta familia de modelos es altamente no trivial tal y como hemos puesto de manifiesto para una serie de modelos magnéticos impuros.

1.4 Dependencia de los estados estacionarios de no equilibrio en la dinámica microscópica

En este apartado queremos hacer mención brevemente a una propiedad característica de los estados estacionarios de no-equilibrio que los diferencia de sus análogos de equilibrio. Podemos enunciar dicha propiedad como sigue:
El estado estacionario de no equilibrio en modelos con competición de dinámicas depende esencialmente de cuál sea la forma funcional de las probabilidades de transición.
Expliquemos ésto mas detenidamente. Supongamos una serie de mecanismos dinámicos de equilibrio, que llamaremos *elementales*. Cada uno de ellos, considerado por separado, cumple una condición de balance detallado en la ecuación maestra correspondiente (1.6), y lleva, por tanto, al sistema a un estado estacionario de equilibrio. Dichos estados estacionarios son diferentes, pues el conjunto de parámetros, $\underline{K}$, es distinto para cada mecanismo dinámico elemental. Cada uno de los estados de equilibrio es *independiente* de la forma de la función $D[\lambda]$, definida en 1.2.1, que se esté considerando para el mecanismo elemental en cuestión, para $\underline{K}$ fijo. Sin embargo, cuando las distintas dinámicas actúan simultáneamente, (1.14), y el sistema alcanza un estado estacionario de no-equillibrio, $P_{est}(\underline{s})$, éste resulta ser *fuertemente dependiente* de la forma de las funciones $D[\lambda]$ que definen a cada uno de los mecanismos elementales. De este modo, los estados estacionarios de no equilibrio *no son invariantes* ante cambios en las formas funcionales de las funciones $D[\lambda]$, compatibles con (1.8). Basta con modificar para uno de los mecanismos elementales su función $D[\lambda]$ asociada para que la distribución estacionaria sea distinta.

En resumen: *cambios en la forma de la función $D[\lambda]$, compatibles con (1.8), no afectan a los estados estacionarios de equilibrio, pero sí a los de no-equilibrio, por lo que la forma del diagrama de las fases de un modelo dado depende fuertemente de la forma explícita de las probabilidades de transición que se considere.*
Así, por ejemplo, en los modelos del apartado anterior consideramos probabilidades de transición del tipo, $D[\lambda] = \exp[-\lambda/2]$, (1.13) y calculamos la solución estacionaria asociada. Si, en lugar de esta, tomamos, por ejemplo, $D[\lambda] = 1 - \tanh[\lambda/2]$, (1.11), la solución estacionaria es diferente y, de hecho, no sabemos como calcularla.
Esta propiedad es plenamente confirmada tanto en modelos exactamente resolubles, como en simulaciones Monte Carlo [112, 113], como en teorías de campo medio [129].
Cuando estudiemos la criticalidad de este tipo de modelos prestaremos especial atención a la influencia que la forma de estas funciones $D[\lambda]$ pueda tener en el comportamiento crítico, en particular, analizaremos si los puntos fijos de las ecuaciones de grupo de renormalización son estables ante cambios en la forma funcional de $D[\lambda]$.

Capítulo 2

Ecuaciones de Fokker-Planck para modelos de no equilibrio.

En el capítulo anterior hemos introducido una familia de modelos de no equilibrio definidos a través de una ecuación maestra en la que compiten diferentes mecanismos dinámicos, dando lugar a distribuciones estacionarias que no pueden caracterizarse por una medida de Gibbs. Mientras que, en los modelos análogos de equilibrio, la teoría de colectividades permite obtener de forma sistemática información física sobre sus estados estacionarios [1] sin necesidad de resolver la ecuación maestra, para los sistemas fuera del equilibrio no existe tal alternativa. La falta de una teoría general de estados estacionarios de no-equilibrio, análoga a la teoría de colectividades de equilibrio, hace que cualquier tipo de información que desee obtenerse de estos sistemas, requiera un análisis explícito de la ecuación maestra.

El problema de resolver una ecuación maestra, para obtener la función de distribución de probabilidad asociada, es matemáticamente equivalente al de resolver el conjunto de ecuaciones para las correlaciones que se derivan de ella [89]. Dicho conjunto es un sistema infinito de ecuaciones diferenciales temporales, que usualmente están fuertemente acopladas entre sí, y son de naturaleza no lineal. Las dificultades para abordar tal situación hacen necesario, salvo en casos particularmente sencillos, exactamente resolubles, el uso métodos aproximados y/o simulaciones numéricas. En particular, para tener alguna información sobre el comportamiento de dichos sistemas, se suele recurrir a aproximaciones de tipo campo medio [27, 28, 4, 5], esquemas perturbativos [112], entre otras técnicas, o bien a simulaciones por ordenador tipo Monte Carlo [12, 112, 52, 1] o de dinámica molecular [76].
Aunque estos métodos de trabajo han resultado fructíferos en el estudio de sistemas de no equilibrio, nuestro objetivo no es sacar partido de ellos, sino proponer un nuevo tipo de aproximación sistemática que nos permita obtener información complementaria o su-

[1] Que exista un método sistemático no quiere decir que éste sea sencillo, ni que pueda llevarse en cualquier caso hasta el final [120, 10].

plementaria a la ya conocida. El esquema que planteamos en este trabajo para analizar ecuaciones maestras en sistemas fuera del equilibrio es diferente a los que acabamos de mencionar y se basa en la caracterización mediante ecuaciones contínuas, de tipo Fokker-Planck , de dichos sistemas.

2.1 ¿Por qué ecuaciones de Fokker-Planck ?

Dado un cierto sistema físico fuera del equilibrio, dos posibles alternativas para estudiarlo consisten en definir, bien modelos discretos, como los considerados en el capítulo anterior, o bien contínuos, escritos en términos de variables contínuas.
Las descripciones contínuas implican la definición de un conjunto de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales que caracterizan la evolución del sistema a nivel *mesoscópico*, entendiendo por tal, un nivel de descripción intermedio entre el microscópico y el macróscopico: menos fino que el primero, pues considera variables promediadas, pero más detallado que el segundo, puesto que permite considerar las fluctuaciones de dichas variables [89].
Los modelos mesoscópicos se construyen capturando determinadas características concretas del sistema que pretenden representar, como son: su dimensión, simetrías, leyes de conservación, y/o alguna otra propiedad relevante, mientras que muchos de los detalles microscópicos se consideran supérfluos y no son tenidos en cuenta. Como ejemplos más comunmente utilizados de este tipo de ecuaciones mencionemos las de Boltzmann [126], Navier-Stokes, o Fokker-Planck [123, 148]. La conexión explícita entre este tipo de ecuaciones y la física microscópica subyacente, no es trivial en absoluto, y de hecho, en la mayoría de los casos dichas ecuaciones se construyen obedeciendo a criterios intuitivos y no detalladamente. Sólo para casos particulares se ha podido llevar a cabo una construcción rigurosa de ecuaciones mesoscópicas partiendo de modelos microscópicos discretos [2], teniendo todas las deducciones existentes en común el hecho de que requieren la definición de variables promediadas y un reescalamiento simultáneo de las variables espaciales y temporales. En cualquier caso, no se dispone de un método riguroso, lo suficientemente general, que permita obtener de forma sistemática versiones contínuas de modelos microscópicos. En cada caso particular se hace, por tanto, necesario construir este tipo de ecuaciones basándose en argumentos *ad hoc.*

La ventaja de caracterizar un cierto sistema mediante una ecuación mesoscópica, en particular, una ecuación de Fokker-Planck , es que hace posible la utilización de herramientas teóricas desarrolladas para sistemas contínuos, de uso común en *teoría de campos.* En particular, las ecuaciones contínuas son especialmente útiles para estudiar criticalidad a través de la renormalización de los modelos, y haciendo uso del grupo de renormalización como argumentamos en la introducción.

[2] Vease, por ejemplo, la construcción de una ecuación de reacción-difusión contínua a partir de un modelo estocástico microscópico [115].

Aunque, en principio, es también posible aplicar estas técnicas sobre un retículo [3] el tratamiento contínuo es mucho más sistemático y estándar [4].
De entre los distintos tipos de ecuaciones mesoscópicas que se pueden considerar, elegimos el trabajar con ecuaciones de Fokker-Planck , pues son las que guardan una relación más estrecha, con las ecuaciones maestras que definen nuestros modelos.

Llamamos ecuación de Fokker-Planck a una ecuación con la siguiente estructura:

$$\partial_t P_t(\underline{q}) = \sum_{i=1}^{M} \frac{\partial}{\partial q_i} \left[K_i(\underline{q}) P_t(\underline{q}) + \sum_{j=1}^{M} \frac{\partial}{\partial q_j} K_{ij}(\underline{q}) P_t(\underline{q}) \right] \tag{2.1}$$

siendo $\underline{q} = \{q_1, q_2, ..., q_M\}$ un conjunto de variables contínuas que caracteriza el sistema, $P_t(\underline{q})$ la función de probabilidad de tener el sistema en $\underline{q}$ en un tiempo t, y $K_i(\underline{q})$ y $K_{ij}(\underline{q})$ dos funciones diferenciables. Exigimos además a la matriz formada por las componentes K_{ij} ser definida positiva, o al menos semipositiva [56, 148, 89]. Si en lugar de un conjunto finito de M variables, se tiene un contínuo de variables caracterizando el sistema, los sumatorios habrán de ser sustituidos por integrales, y las derivadas por derivadas funcionales, manteniéndo la ecuación la misma estructura.

Un último punto que queremos dejar claro antes de seguir adelante, es el siguiente: Dado que, como acabamos de justificar, queremos estudiar sistemas de no-equilibrio descritos por ecuaciones contínuas ¿por qué no considerar directamente sistemas definidos mediante una ecuación de Fokker-Planck (como se hace frecuentemente en la literatura) y obviar su posible justificación microscópica detallada?.
La respuesta a esta pregunta se basa en los dos siguientes argumentos:

1. Existe gran cantidad de resultados procedentes tanto de simulaciones Monte Carlo [112, 113], como de aproximaciones de campo medio sobre los modelos reticulares tipo Ising definidos por una ecuación maestra con competición de dinámicas [4, 5, 113]. Dichos resultados no han podido ser sistematizados en una teoría general que pueda predecir, a priori, el comportamiento de estos sistemas sin necesidad de resolver explícitamente la ecuación maestra. De hecho, a veces los resultados son controvertidos y dependientes del esquema de resolución que se emplee [5]. Cualquier nueva aproximación sistemática aplicable a estos modelos, interesantes por sí mismos, que pueda arrojar luz sobre su comportamiento físico será valiosa.

[3] Vease, para modelos estáticos: renormalización "a la Wilson" [170], y renormalización en espacio real, introducida por Mazenko [117, 118, 119]. Un esquema de renormalización en modelos reticulares cinéticos puede encontrarse en los trabajos de Dekker y Haake [22, 23, 24].

[4] Así, por ejemplo, los esquemas de *renormalización dinámica en espacio real* presentan fuertes inconvenientes que los hacen inviables en general. Al aplicar una transformación de bloques, tipo Kadanoff, a una ecuación maestra se pierde el caracter markoviano en la ecuación transformada [22, 23, 24], lo cual complica extraordinariamente cálculos ulteriores.

[5] Vease, por ejemplo, la discrepancia entre [165] y [103, 84].

2. Como hemos visto en el capítulo anterior, los estados estacionarios en sistemas de no-equilibrio son extraordinariamente sensibles a las características de la dinámica microscópica que los define. Como consecuencia de esto una descripción contínua apriorística de los mismos necesariamente perdería detalles cuya influencia en los resultados finales podría ser no trivial, y en cualquier caso no estaría controlada. De hecho, uno de nuestros principales objetivos en esta memoria consiste en estudiar como los detalles de la dinámica que define la ecuación maestra afectan a los resultados finales.

Así pues, nuestro esquema consistirá en considerar modelos definidos a través de una ecuación maestra, y caracterizarlos, de la forma más precisa posible mediante una ecuación de Fokker-Planck . Dicha ecuación será el punto de partida para análizar propiedades físicas de los sistemas en cuestión, en particular estudiaremos: potenciales de no equilibrio, diagramas de las fases, metaestabilidades, criticalidad, etc, poniendo, en cualquier caso, especial énfasis en cómo dependen los resultados de la forma de la dinámica microscópica.
En este capítulo estudiaremos la forma de conseguir descripciones contínuas de modelos definidos en términos de ecuaciones maestras de naturaleza discreta, e introduciremos un nuevo tipo de ecuación de Fokker-Planck construida mediante la imposición de ciertos requisitos mínimos, que nos permitirán sacar partido de ella posteriormente.
Dichos requisitos son los siguientes:

1. La ecuación de Fokker-Planck debe depender explícitamente de la forma analítica de las probabilidades de transición microscópicas.
   La dependencia de los estados estacionarios en la forma de la dinámica microscópica es característica de los sistemas de no equilibrio, y cualquier teoría que pretenda describir fielmente dichos sistemas habrá de tenerla en cuenta.

2. La dinámica determinista asociada debe ser descrita exactamente.
   Esto es; en el límite en que las fluctuaciones son completamente despreciadas, las ecuaciones asociadas a la ecuación maestra original y a la de Fokker-Planck deben coincidir.

3. En el límite de equilibrio, donde sólo un mecanismo dinámico actúa, la ecuación de Fokker-Planck debe describir la solución estacionaria de forma exacta.

4. La distribución estacionaria de no equilibrio asociada, debe ser exacta, al menos en un entorno de los extremales de su análoga exacta. De este modo garantizamos que posteriores estudios de comportamientos críticos, esto es, de inestabilidades de los extremales, basados en la ecuación de Fokker-Planck , sean fidedignos.

Es importante resaltar el hecho de que *estos requisitos no son satisfechos por las ecuaciones de Fokker-Planck comunmente usadas en la literatura como aproximaciones*

UNIVERSIDAD DE GRANADA
18 MAR. 1994
COMISION DE DOCTORADO

de la ecuación maestra, como son los modelos A y B de Hohenberg y Halperin [74], la ecuación de Fokker-Planck proviniente e truncar un desarrollo de Kramers-Moyal [89, 148], o la que aparece en el desarrollo en Ω de van Kampen [89], por lo que una nueva forma de representar ecuaciones maestras, más cuidadosa, es necesaria [6].

2.2 Construcción de ecuaciones de Fokker-Planck.

2.2.1 Modelo discreto de partida.

Sea un retículo cúbico d-dimensional, y definamos en cada nudo, $\underline{x} \in Z^d$ una variable de espín $s(\underline{x}) = \pm 1$. Consideremos ahora un cierto hamiltoniano de interacción genérico, que denotamos $H_0(\underline{x}; \underline{K})$ siendo ahora $\underline{K} = \{K_i,\ i = 1, ..., n\}$, el conjunto de parámetros que define la interacción. Puesto que las variables de espín son discretas y nuestro propósito es construir una ecuación de tipo contínuo, definamos el siguiente nuevo conjunto de variables

$$\Phi_\Omega(\underline{x}) \equiv \frac{1}{\Omega} \sum_{\underline{y} \in \Lambda_{\underline{x}}^\Omega} s(\underline{y}), \qquad \underline{x} \in Z^d, \tag{2.2}$$

donde $\Lambda_{\underline{x}}^\Omega \subset Z^d$ es un volumen centrado en $\underline{x}$ que contiene Ω nudos de la red. Nótese que las variables Φ_Ω puede tomar $2\Omega + 1$ valores equiespaciados entre -1 y $+1$. Supongamos que el hamiltoniano de interacción puede escribirse en las nuevas variables como:

$$H^\Omega(\underline{\Phi}_\Omega; \underline{K}) \equiv H_0(\underline{s}(\underline{\Phi}_\Omega); \underline{K}) = \sum_{\underline{x} \in Z^d} h_0^\Omega(\underline{\Phi}_\Omega(\underline{x}); \underline{K}), \tag{2.3}$$

con $\underline{\Phi}_\Omega = \{\Phi_\Omega(\underline{x}),\ \underline{x} \in Z^d\}$. Una posible forma del hamiltoniano (2.3) en una dimensión es

$$H^\Omega(\underline{\Phi}_\Omega; \{\mu, \lambda\}) = \sum_x \{[\Omega(\Phi_\Omega(x) - \Phi_\Omega(x-1)]^2 + \mu^2 \Phi_\Omega(x)^2 + \lambda \Phi_\Omega(x)^4\}. \tag{2.4}$$

utilizado frecuentemente en la bibliografía [176, 6, 138].
Consideramos el radio caracterísco de una región $\Lambda_{\underline{x}}^\Omega$ del orden de la longitud de correlación entre los espines. Bajo este supuesto, podemos garantizar que $\Phi_\Omega(\underline{x})$ es una función "suave" de $\underline{x}$, esto es, que podemos escribir $\Phi_\Omega(\underline{x}) = \Phi(\Omega^{-1/d}\underline{x})$, donde $\Phi(\underline{r})$ es una función analítica en $\underline{r}$. Si a_0 es el parámetro de red original, definimos uno nuevo reescalado como $a = \Omega^{1/d} a_0$. El límite al contínuo se define haciendo $|a_0| \to 0$ y $\Omega \to \infty$ simultáneamente, manteniendo $a = 1$. En este límite (2.3) se transforma en

$$H^\Omega(\underline{\Phi}; \underline{K}) = \Omega \int_{R^d} d\underline{r}\ \ h(\underline{\Phi}(\underline{r}); \underline{K}). \tag{2.5}$$

[6] En el caso de que las probabilidades de transición asociadas a una ecuación maestra dada sean polinómicas, es posible derivar una ecuación de Fokker-Planck de forma exacta, utilizando transformaciones de Poisson [41, 17]. Desafortunedamente, las ecuaciones maestras que consideraremos en este trabajo no son del tipo requerido para aplicar tal método.

Este límite contínuo implica que sólo podemos estudiar fenómenos en una escala del orden de alguna longitud macroscópica característica.
Nótese, que aparece un factor Ω en la expresión de este hamiltoniano contínuo. Este factor será esencial, como veremos, en los desarrollos que siguen. Hemos considerado que el hamiltoniano original de espines (2.3) es tal que el hamiltoniano contínuo final no depende de correciones de orden Ω^0 ni superiores. Esta situación no es la más general posible, pero, en cualquier caso, la esencia del desarrollo que vamos a describir no se ve afectada por la presencia de dichas correciones, que son omitidas, únicamente, por no complicar demasiado la notación. Dejamos como un simple ejercicio para el lector repetir todos cálculos que siguen incluyendo las correciones de orden Ω^0.
Supongamos ahora que el sistema de espines que acabamos de definir evoluciona mediante una dinámica estocástica de inversión de espines. Un cambio en un espín individual se traduce en un cambio de módulo $2/\Omega$ en todos los campos Φ en los cuales está contenido. Por lo tanto, una distribución de probabilidad de campos Φ evolucionará en el tiempo de acuerdo con una ecuación maestra de tipo markoviano en la que se reflejen dichos cambios. Consideraremos que la probabilidad de tener una cierta configuración $\underline{\Phi}$, en un instante de tiempo t, $P_t^\Omega(\underline{\Phi})$ obedece la siguiente ecuación:

$$\partial_t P_t^\Omega(\underline{\Phi}) = \int_{R^d} d\underline{r} \int_R d\eta f(\eta) \left[w^\Omega(\underline{\Phi}^{\eta,\underline{r}} \to \underline{\Phi}) P_t^\Omega(\underline{\Phi}^{\eta,\underline{r}}) - w^\Omega(\underline{\Phi} \to \underline{\Phi}^{\eta,\underline{r}}) P_t^\Omega(\underline{\Phi}) \right], \quad (2.6)$$

donde

$$\underline{\Phi}^{\eta,\underline{r}} = \left\{ \Phi(\underline{r}') + \frac{\eta}{\Omega} \delta_{\underline{r},\underline{r}'}, \ \ \underline{r}' \in R^d \right\}, \quad (2.7)$$

y $f(\eta)$ es la función de distribución de los posibles incrementos de las variables Φ, que se supone simétrica, $f(\eta) = f(-h)$, y analítica en torno a $\eta = 0$. Por último, $w(\underline{\Phi} \to \underline{\Phi}')$ es la probabilidad por unidad de tiempo de que el sistema cambie de $\underline{\Phi}$ a $\underline{\Phi}'$. Al igual que en el capítulo anterior, estas probabilidades de transición se definen mediante la superposición estocástica de diferentes mecanismos elementales de equilibrio, esto es:

$$w^\Omega(\underline{\Phi} \to \underline{\Phi}') = \int_{R^n} d\underline{K} \ p(\underline{K}) w^\Omega(\underline{\Phi} \to \underline{\Phi}'; \underline{K}), \quad (2.8)$$

donde $p(\underline{K})$ es una función de distribución dada a priori, que forma parte de la definición del modelo, y cada una de las dinámicas elementales de equilibrio, $w(\underline{\Phi} \to \underline{\Phi}'; \underline{K})$, tiende a llevar al sistema a un estado estacionario de la forma: $P_{eq}^\Omega(\underline{\Phi}; \underline{K}) \propto \exp[-H^\Omega(\underline{\Phi}; \underline{K})]$. Para ello, es condición suficiente, como hemos visto en el capítulo anterior, que cada una de ellas cumpla la condición de balance detallado,

$$w^\Omega(\underline{\Phi} \to \underline{\Phi}'; \underline{K}) = D[H^\Omega(\underline{\Phi}'; \underline{K}) - H^\Omega(\underline{\Phi}; \underline{K})] \quad (2.9)$$

donde la función $D[\lambda]$ cumple las propiedades (1.8).
De este modo hemos completado la definición y justificación microscópica de nuestro modelo.
Vemos que en la ecuación (2.6) hay un parámetro natural Ω que refleja su origen microscópico. Como ya se ha dicho, dicho parámetro ha de ser lo suficientemente grande

como para poder definir de forma precisa el límite al contínuo. De este modo tenemos un parámetro natural para desarrollar la ecuación maestra [89].
El desarrollo en potencias de Ω de la ecuación maestra, (2.6), conduce a

$$\begin{aligned}\partial_t P_t^{\Omega}(\underline{\Phi}) &= \int_{R^d} d\underline{r} \int_R d\eta f(\eta) \Big[\Big\{ \ll D(-U_\eta(\underline{\Phi}(\underline{r});\underline{K}) - W_\eta^{\Omega}(\underline{\Phi}(\underline{r});\underline{K})) \gg \\ &\quad - \ll D(U_\eta(\underline{\Phi}(\underline{r});\underline{K}) + W_\eta^{\Omega}(\underline{\Phi}(\underline{r});\underline{K})) \gg \Big\} P_t^{\Omega}(\underline{\Phi}) \\ &\quad + \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l!} \left(\frac{\eta}{\Omega}\right)^l \frac{\delta^l P_t^{\Omega}(\underline{\Phi})}{\delta\Phi(\underline{r})^l} \ll D(-U_\eta(\underline{\Phi}(\underline{r});\underline{K}) - W_\eta^{\Omega}(\underline{\Phi}(\underline{r});\underline{K})) \gg \Big] \end{aligned} \tag{2.10}$$

donde

$$U_\eta(\underline{\Phi}(\underline{r});\underline{K}) = \eta \frac{\delta \hat{H}(\underline{\Phi};\underline{K})}{\delta\Phi(\underline{r})} \tag{2.11}$$

y

$$W_\eta^{\Omega}(\underline{\Phi}(\underline{r});\underline{K}) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{(l+1)!} \frac{\eta^{l+1}}{\Omega^l} \frac{\delta^{l+1}\hat{H}(\underline{\Phi};\underline{K})}{\delta\Phi(\underline{r})^{l+1}} , \tag{2.12}$$

siendo

$$\ll A \gg \equiv \int_{R^n} d\underline{K}\ p(\underline{K}) A(\underline{K}) \tag{2.13}$$

y

$$\hat{H}(\underline{\Phi};\underline{K}) \equiv \Omega^{-1} H^{\Omega}(\underline{\Phi};\underline{K}). \tag{2.14}$$

Este no es sino el desarrollo de Kramers-Moyal de la ecuación maestra [89].
Antes de seguir adelante con nuestro desarrollo, veamos algunas posibles ramificaciones del mismo, que dan lugar a ecuaciones de Fokker-Planck frecuentemente consideradas en la literatura.

1. **Ecuación Fokker-Planck de Kramers-Moyal.**
   Una forma de obtener una ecuación de Fokker-Planck partiendo de una ecuación maestra consiste en truncar en segundo orden el desarrollo de Kramers-Moyal, (2.10), [89], obteniéndose de forma directa:

$$\begin{aligned}\partial_t P_t^{\Omega}(\underline{\Phi}) = -\int_{R^d} d\underline{r} \int_R d\eta f(\eta) \Big[\frac{\partial}{\partial\Phi(\underline{r})} \ll D(U_\eta(\underline{\Phi}(\underline{r}),\underline{K})) \gg P_t^{\Omega}(\underline{\Phi}) \\ -\frac{1}{2}\eta \frac{1}{\Omega} \frac{\partial^2}{\partial\Phi^2(\underline{r})} \ll D(U_\eta(\underline{\Phi}(\underline{r});\underline{K})) \gg P_t^{\Omega}(\underline{\Phi}) \Big] \end{aligned} \tag{2.15}$$

   Esta ecuación puede resultar útil en muchas situaciones, como por ejemplo, para estudiar fluctuaciones en torno a estados estacionarios de equilibrio, [70]. Sin embargo no satisface los requisitos mínimos impuestos. En particular, aunque mantiene cierta dependencia en la dinámica microscópica, ésta no está contemplada con precisión. De hecho, en el límite de equilibrio no se reproduce la distribución estacionaria exacta.

2. **El modelo A de Hohenberg-Halperin.**
Otra posibilidad para construir una ecuación de Fokker-Planck consiste en considerar que el hamiltoniano contínuo es de la forma

$$H^{\Omega}(\underline{\Phi};\underline{K}) = \int_{R^d} d\underline{r}\ \ h(\underline{\Phi}(\underline{r});\underline{K}), \tag{2.16}$$

es decir, la misma forma que (2.5) salvo por el factor Ω que se omite. Llevando esto al desarrollo de Kramers-Moyal, y haciendo uso de los resultados del apéndice A, se obtiene

$$\partial_t P_t^{\Omega}(\underline{\Phi}) = \int_{R^d} d\underline{r} \int_R d\eta f(\eta) \Big[\eta \frac{\partial}{\partial \Phi(\underline{r})} \ll U_\eta(\underline{\Phi}(\underline{r}),\underline{K})) \gg P_t^{\Omega}(\underline{\Phi}) + \eta^2 \frac{1}{\Omega} \frac{\partial^2}{\partial \Phi^2(\underline{r})} P_t^{\Omega}(\underline{\Phi}) \Big] \tag{2.17}$$

donde definiendo un hamiltoniano efectivo según

$$\frac{\partial H_{ef}(\underline{\Phi})}{\partial \Phi(\underline{r})} \equiv \ll \frac{\partial \hat{H}(\underline{\Phi};\underline{K})}{\partial \Phi(\underline{r})} \gg \tag{2.18}$$

y considerando por ejemplo,

$$f(\eta) = \frac{1}{2}(\delta(\eta - 1) + \delta(\eta + 1)) \tag{2.19}$$

se tiene una forma del modelo A de Hohenberg y Halperin [74], con respecto al hamiltoniano $H_{ef}(\underline{\Phi})$.
Nótese que en esta ecuación, cualquier dependencia en la forma funcional de las probabilidades de transición, en particular, en la forma de la función D, se pierde por completo, De hecho, en esta aproximación sólo aparecen los dos primeros términos de un desarrollo en series de potencias de D, siendo estos constantes para toda función D que satisfaga (1.8) (véase apéndice A). Consecuentemente, tampoco esta aproximación satisface los requisitos mínimos impuestos.

Hecho este inciso, volvamos a considerar la ecuación (2.10).
Supongamos que para valores de Ω suficientemente grandes la distribución de probabilidad puede escribirse como,

$$P_t^{\Omega}(\underline{\Phi}) = N_t^{\Omega} \exp[-V_t^{\Omega}(\underline{\Phi})] \tag{2.20}$$

con

$$V_t^{\Omega}(\underline{\Phi}) = \Omega V_{0,t}(\underline{\Phi}) + V_{1,t}(\underline{\Phi}) + O(\Omega^{-1}) \tag{2.21}$$

donde

$$N_t^{\Omega} = \int d\underline{\Phi} \exp[-V_t^{\Omega}(\underline{\Phi})] \tag{2.22}$$

es la constante de normalización y a V_t^Ω se le denomina *potencial de no equilibrio dependiente del tiempo.*

Suponemos que existe el límite siguiente:

$$\lim_{t\to\infty} V_t^\Omega = V_{est}^\Omega \tag{2.23}$$

y que éste es único y bien definido. A la función límite se le denomina *potencial estacionario de no equilibrio*, o simplemente *potencial de no equilibrio* [101].

Nótese la diferencia entre un hamiltoniano como (2.5) y un potencial de no equilibrio: el primero es una clase particular de potencial de no equilibrio, en la que es posible distinguir términos responsables de la interacción local entre los elementos del sistema. El potencial de no equilibrio no es, en general, una función diferenciable en todos los puntos del espacio de las fases sobre los que está definido [7]. En cualquier caso, puede mostrarse que el potencial de no equilibrio es una función de Lyapunov para la evolución determinista del sistema, y nos limitaremos a trabajar de momento, en regiones donde se espera que el potencial sea diferenciable, esto es en las vecindades de sus mínimos [85]. Posteriormente volveremos sobre este punto y estudiaremos aspectos relacionados con la no diferenciabilidad del potencial estacionario (véase capítulo 3).
Sustituyendo (2.20) en (2.10), y considerando los órdenes dominantes en Ω, se tiene

$$\begin{aligned}
&\partial_t \ln N_t^\Omega - \Omega\partial_t V_{0,t}(\underline{\Phi}) - \partial_t V_{1,t}(\underline{\Phi}) + O(\Omega^{-1}) = \\
&\int_{R^d} d\underline{r} \int_R d\eta f(\eta) \left[\ll D(U_\eta(\underline{\Phi}(\underline{r}); \underline{K})) \gg \left[\exp\left(\eta \frac{\delta V_{0,t}}{\delta\Phi(\underline{r})}\right) - 1 \right] \right. \\
&\left. - \frac{\eta}{2\Omega} \frac{\delta}{\delta\Phi(\underline{r})} \left\{ \ll D(U_\eta(\underline{\Phi}(\underline{r}); \underline{K})) \gg \left[1 + \exp\left(\eta \frac{\delta V_{0,t}}{\delta\Phi(\underline{r})}\right) \right] \right\} \right. \\
&\left. + \frac{\eta}{\Omega} \ll D(U_\eta(\underline{\Phi}(\underline{r}); \underline{K})) \gg \exp\left(\eta \frac{\delta V_{0,t}}{\delta\Phi(\underline{r})}\right) \frac{\delta V_{1,t}}{\delta\Phi(\underline{r})} \right] + O(\Omega^{-2}).
\end{aligned} \tag{2.24}$$

A partir de (2.24) podemos extraer los siguientes resultados:

1. **Ecuación determinista.**
   Introducimos una nueva variable temporal reescalada, $\tau = \Omega^{-1}t$, y tomamos el límite $\Omega \to \infty$, la solución de (2.10) queda

   $$P_\tau(\underline{\Phi}) = \delta(\underline{\Phi} - \underline{v}_\tau) \tag{2.25}$$

   con

   $$\partial_\tau v_\tau(\underline{r}) = \int_R d\eta f(\eta)\eta \ll D(U_\eta(\underline{v}_\tau(\underline{r}); \underline{K})) \gg \tag{2.26}$$

   donde hemos multiplicado por v_τ, tomado el promedio sobre todas las configuraciones e integrado por partes. A esta última ecuación se le suele llamar *ecuación*

[7] Vease al repecto la serie de artículos de Graham, [56, 57, 58, 59].

determinista. Resaltamos el hecho de que esta ecuación es claramente dependiente de la forma analítica de las probabilidades de transición microscópicas, D, y que ésto es así debido a la presencia del factor Ω en (2.5) que define a las probabilidades de transición (2.8). Concluimos, por tanto, que *el cambio de las variables microscópicas a las mesoscópicas, es esencial para obtener una descripción determinista correcta.*
Hay una última propiedad que queremos mencionar aquí y que será útil más adelante.

Propiedad 1 *Los extremales del potencial de no equilibrio de orden cero $V_{0,t}(\underline{\Phi})$ evolucionan siguiendo trayectorias deterministas, esto es*

$$\left.\frac{\delta V_{0,t}(\underline{\Phi})}{\delta\Phi(\underline{r})}\right|_{\underline{\Phi}=\underline{v}_\tau} = 0. \tag{2.27}$$

Demostración:
A partir de (2.20), y para grandes valores de Ω, asumimos que se tiene una solución de la forma (2.20). Puesto que $V_{0,t}$ está acotado inferiormente, tiene al menos un mínimo absoluto en su dominio de definición. Desarrollando el potencial de no equilibrio dependiente del tiempo en torno a dicho mínimo, se tiene,

$$P_t^\Omega(\underline{\Phi}) = N_t^\Omega \exp\left[-\Omega \int_{R^d\otimes R^d} d\underline{r}d\underline{r}' A_t(\underline{r},\underline{r}')\Upsilon_t(\underline{r})\Upsilon_t(\underline{r}') + O(\Omega\Upsilon^3, \Omega^0\Upsilon)\right] \tag{2.28}$$

donde $\Upsilon_t(\underline{r}) = \Phi(\underline{r}) - \Phi_t^*(\underline{r})$, y $\underline{\Phi}_t^*$ es un mínimo de $V_{0,t}(\underline{\Phi})$, esto es,

$$\left.\frac{\delta V_{0,t}(\underline{\Phi})}{\delta\Phi(\underline{r})}\right|_{\underline{\Phi}=\underline{\Phi}_t^*} = 0. \tag{2.29}$$

Nótese que podemos calcular la derivada del potencial, pues en un entorno de sus mínimos se espera que sea diferenciable [85].
A partir de (2.28) vemos que para todas las configuraciones tales que

$$\lim_{\Omega\to\infty} \Omega^{1/2}|\Upsilon_t(\underline{r})| = \infty, \ \forall \underline{r} \in R^d, \tag{2.30}$$

su probabilidad de ocurrir decae exponencialmente con Ω, y por lo tanto son despreciables en el límite $\Omega \to \infty$. El resto de configuraciones son importantes en dicho límite. Consideremos una configuración tal que $|\Upsilon_t(\underline{r})| \leq \Omega^{-1/2}$, $\forall \underline{r} \in R^d$ [8]; la evolución de la probabilidad viene dada por la solución de (2.24) en primer orden de Ω. Sustituyendo (2.28) en (2.24) se tiene una ecuación para la evolución

[8] Esto es una forma de decir que las fluctuaciones de las variables mesoscópicas de un sistema son de orden $\Omega^{1/2}$, lo cual es un hecho ampliamente conocido [89].

de $\underline{\Phi}_t^*$. Reescalando el tiempo según $\tau = \Omega^{-1}t$, y conservando sólo los órdenes dominantes en Ω, se tiene

$$\int_{R^d\otimes R^d} d\underline{r}d\underline{r}' A_t(\underline{r},\underline{r}')\partial_\tau \Phi_\tau^*(\underline{r})\Upsilon_t(\underline{r}') = \int_{R^d\otimes R^d} d\underline{r}d\underline{r}' \int_R d\eta f(\eta)\eta \ll D(U_\eta(\underline{\Phi}_\tau^*(\underline{r});\underline{K})) \gg A_t(\underline{r},\underline{r}')\Upsilon_t(\underline{r}') \tag{2.31}$$

válida para $|\Upsilon_t(\underline{r})| \leq \Omega^{1/2}$, y $\forall \underline{r} \in R^d$.
Sustituyendo $\int_R d\eta f(\eta)\eta \ll D(U_\eta(\underline{\Phi}_\tau^*(\underline{r});\underline{K})) \gg$ dado por la ecuación (2.26) en (2.31), se obtiene que $\underline{\Phi}_t^*$ evoluciona del mismo modo que $\underline{v}_t$, solución de la ecuación determinista. †

2. **Estado estacionario.**
Para estudiar el estado estacionario igualamos a cero el primer miembro de (2.24). Con esto, tenemos un sistema de ecuaciones diferenciales cerrado: una ecuación para cada orden en Ω. Su soluciones son los coeficientes, $V_{i,est}$ con $i = 0, 1, ...$, del potencial de no equilibrio. En particular las ecuaciones que aparecen en los dos primeros órdenes son:

$$\int_{R^d} d\underline{r} \int_R d\eta f(\eta) \ll D(U_\eta(\underline{\Phi}(\underline{r});\underline{K})) \gg \left[\exp\left(\eta \frac{\delta V_{0,est}}{\delta\Phi(\underline{r})}\right) - 1\right] = 0 \tag{2.32}$$

y

$$-\int_{R^d} d\underline{r} \int_R d\eta f(\eta)\frac{\eta}{2}\left[\frac{\delta}{\delta\Phi(\underline{r})}\left\{\ll D(U_\eta(\underline{\Phi}(\underline{r});\underline{K})) \gg \left[1 + \exp\left(\eta\frac{\delta V_{0,est}}{\delta\Phi(\underline{r})}\right)\right]\right\}\right.$$
$$\left. -2 \ll D(U_\eta(\underline{\Phi}(\underline{r});\underline{K})) \gg \exp\left(\eta\frac{\delta V_{0,est}}{\delta\Phi(\underline{r})}\right)\frac{\delta V_{1,est}}{\delta\Phi(\underline{r})}\right] = 0. \tag{2.33}$$

Para encontrar el potencial de no equilibrio, podríamos suponer que la distribución estacionaria cumple una propiedad de balance detallado, en el sentido de que (2.32) y (2.33) se siguieran cumpliendo aun sin el símbolo integral, $\int_{R^d} d\underline{r}$, delante de las mismas. Sin embargo, aun en el caso de que pudiésemos despejar las primeras derivadas de $V_{i,est}$ del sistema (2.32), (2.33), esto es, que pudiésemos escribir

$$\frac{\delta V_{i,est}}{\delta\Phi(\underline{r})} = F_i\left[\Phi(\underline{r}), \vec{\nabla}\Phi(\underline{r}), ..., \vec{\nabla}^m\Phi(\underline{r}), ...\right] \tag{2.34}$$

con $i = 0, 1, ...$, no es siempre imposible integrar (2.34). De hecho ésto sólo será posible cuando se cumpla la *condición de potencialidad* [9]. Un ejemplo, en el que si es posible integrar el sitema, es

$$F_i = g_i(\Phi(\underline{r})) + a_i\vec{\nabla}^2\Phi(\underline{r}) \tag{2.35}$$

[9] Vease Apéncide C.

donde g_i y a_i son una función y una constante arbitrarias respectivamente. Sin embargo, no es posible, en general, calcular el potencial de no equillibrio a partir de una condición de balance detallado. Nótese, que cuando actúa un único mecanismo dinámico, esto es, $p(\underline{K}) = \delta(\underline{K} - \underline{K}_0)$, se cumple la condición de balance detallado debido a la forma en que hemos construido las probabilidades de transición (2.9) y, por lo tanto, $V^{\Omega}_{est}(\underline{\Phi}) = H^{\Omega}(\underline{\Phi}; \underline{K}_0)$.

2.2.2 Como construir una ecuación de Fokker-Planck adecuada.

Escribamos en una forma genérica la ecuación de Fokker-Planck : [10]

$$\partial_t P^{\Omega}_t(\underline{\Phi}) = \frac{1}{\Omega}\int_{R^d} d\underline{r}\frac{\delta}{\delta\Phi(\underline{r})}\left[\Xi_0(\underline{\Phi}(\underline{r})) + \frac{1}{\Omega}\Xi_1(\underline{\Phi}(\underline{r})) + \frac{1}{\Omega}\Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r}))\frac{\delta}{\delta\Phi(\underline{r})}\right] P^{\Omega}_t(\underline{\Phi}), \tag{2.36}$$

Queremos fijar los funcionales Ξ_0, Ξ_1 y Ξ_2, de tal manera que se cumplan, al menos, las ecuaciones (2.10), (2.25) y (2.26). Esto es, deseamos construir una ecuación de Fokker-Planck de tal manera que su solución reproduzca de forma exacta los dos órdenes dominantes del potencial de no equilibrio. Puesto que Ω toma valores altos, esta última será una buena aproximación para describir el comportamiento del sistema original.
Para fijar los funcionales Ξ, sustituyamos (2.20) y (2.21) en (2.36), y desarrollemos en potencias de Ω. La ecuación resultante es:

$$\begin{aligned}
&\partial_t \ln N^{\Omega}_t - \Omega\partial_t V_{0,t}(\underline{\Phi}) - \partial_t V_{1,t}(\underline{\Phi}) + O(\Omega^{-1}) = \\
&\qquad - \int_{R^d} d\underline{r}\frac{\delta V_{0,t}}{\delta\Phi(\underline{r})}\left[\Xi_0(\underline{\Phi}(\underline{r})) - \Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r}))\frac{\delta V_{0,t}}{\delta\Phi(\underline{r})}\right] \\
&\quad -\frac{1}{\Omega}\int_{R^d} d\underline{r}\left[-\frac{\delta\Xi_0(\underline{\Phi}(\underline{r}))}{\delta\Phi(\underline{r})} + \Xi_0(\underline{\Phi}(\underline{r}))\frac{\delta V_{1,t}}{\delta\Phi(\underline{r})} + \Xi_1(\underline{\Phi}(\underline{r}))\frac{\delta V_{0,t}}{\delta\Phi(\underline{r})}\right. \\
&\left. + \frac{\delta\Xi_2}{\delta\Phi(\underline{r})}\frac{\delta V_{0,t}}{\delta\Phi(\underline{r})} + \Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r}))\frac{\delta^2 V_{0,t}}{\delta\Phi(\underline{r})^2} - 2\Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r}))\frac{\delta V_{0,t}}{\delta\Phi(\underline{r})}\frac{\delta V_{1,t}}{\delta\Phi(\underline{r})}\right] + O(\Omega^{-2})
\end{aligned} \tag{2.37}$$

Una condición suficiente para reproducir la dinámica de forma exacta en los dos órdenes dominantes en Ω se obtiene mediante la comparación directa de (2.37) y (2.24)-(2.26):

$$\begin{aligned}
\Xi_0^{exacto}(\underline{\Phi}(\underline{r})) &= -\int_R d\eta f(\eta)\eta \ll D(U_\eta(\underline{\Phi}(\underline{r}); \underline{K})) \gg \\
\Xi_1^{exacto}(\underline{\Phi}(\underline{r})) &= \left(\frac{\delta V_{0,t}}{\delta\Phi(\underline{r})}\right)^{-1}\frac{\delta V_{1,t}}{\delta\Phi(\underline{r})}\int_R d\eta f(\eta) \ll D(U_\eta(\underline{\Phi}(\underline{r}); \underline{K})) \gg \\
&\quad \left\{\exp\left(\eta\frac{\delta V_{0,t}}{\delta\Phi(\underline{r})}\right)\left[\eta + 2\left(\frac{\delta V_{0,t}}{\delta\Phi(\underline{r})}\right)^{-1}\right] - 2\left(\frac{\delta V_{0,t}}{\delta\Phi(\underline{r})}\right)^{-1}\right\}
\end{aligned}$$

[10] Nótese que está ecuación no es esencialmente diferente de (2.1), sino sólo una forma de reescribir la misma, más conveniente en este caso.

$$-\frac{1}{2}\left(\frac{\delta V_{0,t}}{\delta\Phi(\underline{r})}\right)^{-1}\frac{\delta}{\delta\Phi(\underline{r})}\int_R d\eta f(\eta) \ll D(U_\eta(\underline{\Phi}(\underline{r});\underline{K})) \gg$$
$$\left\{\exp\left(\eta\frac{\delta V_{0,t}}{\delta\Phi(\underline{r})}\right)\left[\eta+2\left(\frac{\delta V_{0,t}}{\delta\Phi(\underline{r})}\right)^{-1}\right]-2\left(\frac{\delta V_{0,t}}{\delta\Phi(\underline{r})}\right)^{-1}+\eta\right\}$$

$$\Xi_2^{exacto}(\underline{\Phi}(\underline{r})) = \left(\frac{\delta V_{0,t}}{\delta\Phi(\underline{r})}\right)^{-2}\int_R d\eta f(\eta) \ll D(U_\eta(\underline{\Phi}(\underline{r});\underline{K})) \gg$$
$$\left[\exp\left(\eta\frac{\delta V_{0,t}}{\delta\Phi(\underline{r})}\right)-1-\eta\frac{\delta V_{0,t}}{\delta\Phi(\underline{r})}\right] \tag{2.38}$$

donde Ξ_0^{exacto} se determina imponiendo a la ecuación de Fokker-Planck que su ecuación determinista asociada coincida con (2.26) [11] . Como vemos, los coeficientes, ${\Xi_1}^{exacto}$ y ${\Xi_2}^{exacto}$ dados por (2.38) dependen de forma explícita de la primera derivada del potencial de no equilibrio, cuya forma no es conocida.
Si únicamente estamos interesados en garantizar que la ecuación de Fokker-Planck reproduzca los primeros órdenes de la solución estacionaria, entonces podemos reemplazar $V_{i,t}$ con $i = 0, 1$, por $V_{i,est}$ $i = 0, 1$ en la ecuación (2.38). En dicho caso nos preguntamos si es posible construir una ecuación de Fokker-Planck , tal que su solución coincida con la exacta hasta segundo orden en Ω. La respuesta parece ser *sí, siempre y cuando, conozcamos a priori la solución exacta.* Este es el caso cuando tratamos con sistemas de equilibrio. De hecho, a partir de (2.38) demostramos el siguiente teorema.

Teorema 1 *Sea $H(\underline{\Phi}) = \Omega\hat{H}(\underline{\Phi})$ el hamiltoniano de interacción que caracteriza el estado estacionario de un cierto sistema en equilibrio. Entonces la ecuación de Fokker-Planck (2.36) con coeficientes:*

$$\begin{aligned}\Xi_0(\underline{\Phi}(\underline{r})) &= \Xi_0^{eq}(\underline{\Phi}(\underline{r}))\\ \Xi_1(\underline{\Phi}(\underline{r})) &= 0\\ \Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r})) &= \frac{\Xi_0^{eq}(\underline{\Phi}(\underline{r}))}{\dfrac{\delta\hat{H}(\underline{\Phi})}{\delta\Phi(\underline{r})}}\end{aligned} \tag{2.39}$$

donde

$$\Xi_0^{eq}(\underline{\Phi}(\underline{r})) = -\int_R d\eta f(\eta)\eta D\left(\eta\frac{\delta\hat{H}(\underline{\Phi})}{\delta\Phi(\underline{r})}\right) \tag{2.40}$$

cumple las siguientes propiedades:
i) Reproduce la dinámica determinista exacta dada por (2.26) con

$$\partial_\tau v_\tau(\underline{r}) = \int_R d\eta f(\eta)\eta D\left[\eta\frac{\delta\hat{H}(\underline{v}_\tau)}{\delta v_\tau(\underline{r})}\right] \tag{2.41}$$

[11] Este es el segundo de los requisitos impuestos.

ii) Su solución estacionaria es una distribución de Gibbs, con $P_{est}(\underline{\Phi}) \propto \exp(-H(\underline{\Phi}))$

Demostración:
i) En el límite $\Omega \to \infty$ el coeficiente Ξ_o de la ecuación de Fokker-Planck fija la forma de la ecuación determinista. Por lo tanto, sólo necesitamos mostrar que el coeficiente Ξ_0 de (2.36) dado por (2.39) y (2.40) coincide con el exacto, Ξ_0^{exacto}. Pero esto es cierto por construcción.
ii) Esta segunda parte puede demostrarse sin más que sustituir la distribución estacionaria de Gibbs en la ecuación estacionaria de Fokker-Planck (2.36), $\partial_t P_t^{\Omega} = 0$. †
Nótese como la función D aparece explícitamente en la ecuación de Fokker-Planck , y que caracteriza las propiedades dinámicas del sistema.
Este teorema se ha utilizado, por ejemplo, por Hanggi et al, [69, 70, 53], para estudiar propiedades dinámicas en sistemas biestables con un grado de libertad, para los que siempre es posible encontrar la solución estacionaria exacta.
Sin embargo, cuando tratamos con un modelo de competición de dinámicas, no conocemos a priori el potencial de no equilibrio, y no es por tanto posible encontrar a partir de este teorema una ecuación de Fokker-Planck que reproduzca globalmente el potencial. No obstante, hemos encontrado, que aun sin conocer explícitamente la solución, es posible construir una ecuación de Fokker-Planck tal que su solución estacionaria sea exacta en las vecindades de los extremales del potencial de no equilibrio. Vamos a demostrar ésto mediante los dos siguientes teoremas.

Teorema 2 *Sea una ecuación de Fokker-Planck , (2.36), tal que sus coeficientes cumplen las siguientes propiedades,*

$$\begin{aligned} \Xi_0(\underline{\Phi}(\underline{r})) &= \Xi_0^{exacto}(\underline{\Phi}(\underline{r})) \\ \Xi_2(\underline{v}^*(\underline{r})) &= \frac{1}{2}\int_R d\eta f(\eta)\eta^2 \ll D(U_\eta(\underline{v}^*;\underline{K})) \gg \end{aligned} \tag{2.42}$$

donde $\underline{v}^*$ *es una solución estable de la ecuación determinista estacionaria, (2.26), esto es,* $\partial_\tau \underline{v}^*(\underline{r}) = 0$. *Entonces,*
i) Reproduce la dinámica determinista exacta dada por (2.25) y (2.26).
ii) La componente $V_{0,est}$ *de la solución estacionaria coincide con la exacta en un entorno adecuado de* $\underline{v}^*$.

Demostración:
i) Se demuestra igual que i) del primer teorema.
ii) La componente $V_{0,est}^{exacto}$ del potencial estacionario de no equilibrio es solución de la ecuación de tipo *Hamilton-Jacobi* siguiente (2.32):

$$H_0^{exacto}(\underline{\pi},\underline{\Phi}) \equiv \int_{R^d} d\underline{r} \int_R d\eta f(\eta) \ll D(U_\eta(\underline{\Phi}(\underline{r});\underline{K})) \gg [\exp(\eta\pi(\underline{r})) - 1] = 0 \tag{2.43}$$

donde

$$\pi(\underline{r}) = \frac{\delta V_{0,est}^{exacto}}{\delta \Phi(\underline{r})} \tag{2.44}$$

Análogamente, a partir de (2.36) vemos que la componente $V_{0,est}^{FP}$, del potencial estacionario de no equilibrio asociado a la ecuación de Fokker-Planck viene dado por

$$H_0^{FP}(\underline{\pi}', \underline{\Phi}) \equiv -\int_{R^d} d\underline{r}\ \pi'(\underline{r})\left[\Xi_0(\underline{\Phi}(\underline{r})) - \Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r}))\pi'(\underline{r})\right] = 0 \tag{2.45}$$

donde

$$\pi'(\underline{r}) = \frac{\delta V_{0,est}^{FP}}{\delta \Phi(\underline{r})} \tag{2.46}$$

Ambos potenciales de no equilibrio tienen los mismos mínimos puesto que ambos producen la misma ecuación determinista.

Supongamos que estos potenciales de no equilibrio son diferenciables en un cierto entorno alrededor de cualquiera de sus mínimos [12]. En dicho entorno, podemos aplicar el teorema del apéndice D que asocia a cada ecuación de Hamilton-Jacobi, un cierto sistema dinámico hamiltoniano. Nótese que dicho teorema no puede aplicarse directamente a (2.43) y (2.45) puesto que no podemos garantizar que dichos potenciales sean de clase C^∞ en todo su dominio de definición.

Para construir los correspondientes potenciales, localmente, alrededor de los mínimos debemos resolver primero los sistemas dinámicos caracterizados por los hamiltonianos $H_0^{exacto}(\underline{\pi}, \underline{\Phi})$ y $H_0^{FP}(\underline{\pi}, \underline{\Phi})$, donde $\underline{\pi}$ simboliza ahora los momentos conjugados de $\underline{\Phi}$, esto es,

$$\dot{\Phi}(\underline{r}) = \frac{\delta H_0(\underline{\pi}, \underline{\Phi})}{\delta \pi(\underline{r})} \quad \dot{\pi}(\underline{r}) = -\frac{\delta H_0(\underline{\pi}, \underline{\Phi})}{\delta \Phi(\underline{r})}. \tag{2.47}$$

Las trayectorias asociadas a este sistema dinámico deben satisfacer necesariamente la siguiente condición de contorno: $M = (\underline{0}, \underline{v}^*)$.

Finalmente, el potencial en el punto $\underline{\Phi}$ es igual a la integral a lo largo de una trayectoria que conecta $(\underline{p}_0, \underline{\Phi})$ con M, donde $\underline{\pi}_0$ se fija considerando la trayectoria que comenzando en $\underline{\Phi}$ alcanza M cuando $t \to -\infty$ [56, 57, 58, 59].

Por lo tanto, para demostrar que ambos sitemas dinámicos tienen idénticas soluciones en torno a los puntos estacionarios, sólo necesitamos demostrar que los hamiltonianos H_0^{exacto} y H_0^{FP} coinciden en un entorno de sus mínimos comunes. En nuestro caso, los desarrollos de los hamiltonianos (2.43), (2.45) en torno al mínimo $(\underline{0}, \underline{v}^*)$, son

$$H_0^{exacto}(\underline{\pi}, \underline{\Phi}) = -\int_{R^d \otimes R^d} d\underline{r} d\underline{r}' \Upsilon(\underline{r}')\ \pi(\underline{r}) \frac{\delta \Xi_0^{exacto}(v^*(\underline{r}))}{\delta v^*(\underline{r}')}$$
$$+\frac{1}{2}\int_{R^d} d\underline{r}\ \pi(\underline{r})^2 \int_R d\eta f(\eta)\eta^2 \ll D(U_\eta(\underline{v}^*; \underline{K})) \gg + O(\varepsilon^3) \tag{2.48}$$

[12] Esta conjetura es razonable, puesto que se puede demostrar que estos potenciales son diferenciables para casi cualquier punto, vease, por ejemplo [85], así como la introducción al siguiente capítulo.

y

$$H_0^{FP}(\underline{\pi},\underline{\Phi}) = -\int_{R^d\otimes R^d} d\underline{r}d\underline{r}'\Upsilon(\underline{r}')\ \pi(\underline{r})\frac{\delta\Xi_0(v^*(\underline{r}))}{\delta v^*(\underline{r}')} + \int_{R^d} d\underline{r}\ \pi(\underline{r})^2\ \Xi_2(v^*(\underline{r})) + O(\varepsilon^3) \tag{2.49}$$

respectivamente, con $\Upsilon(\underline{r}) = \Phi(\underline{r}) - v^*(\underline{r})\ \ \forall \underline{r} \in R^d$, y $|\Upsilon(\underline{r})| \sim |\pi(\underline{r})| \leq \varepsilon,\ \ \forall \underline{r} \in R^d$ y se supone la analiticidad de los funcionales $\Xi_i,\ i = 0,1,2$. Ahora es directo verificar que es condición suficiente, para que estos dos desarrollos, (2.48) y (2.49), conincidan, que se satisfagan las condiciones del enunciado del teorema. †

Teorema 3 *Sea una ecuación de Fokker-Planck tal que sus coeficientes son de la forma*

$$\begin{aligned}
\Xi_0(\underline{\Phi}(\underline{r})) &= \frac{1}{2}\left[D_-(\underline{\Phi}(\underline{r})) - D_+(\underline{\Phi}(\underline{r}))\right] \\
\Xi_1(\underline{\Phi}(\underline{r})) &= 0 \\
\Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r})) &= \frac{D_-(\underline{\Phi}(\underline{r})) - D_+(\underline{\Phi}(\underline{r}))}{2\ln\left[\dfrac{D_-(\underline{\Phi}(\underline{r}))}{D_+(\underline{\Phi}(\underline{r}))}\right]}
\end{aligned} \tag{2.50}$$

con

$$D_\eta(\underline{\Phi}(\underline{r})) = \ll D(U_\eta(\underline{\Phi}(\underline{r})); \underline{K}) \gg . \tag{2.51}$$

Entonces, para

$$f(\eta) = \frac{1}{2}\left[\delta(\eta - 1) + \delta(\eta + 1)\right], \tag{2.52}$$

i) Reproduce la dinámica determinista exacta dada por las ecuaciones (2.25) y (2.26).

ii) Las componentes $V_{0,est}$ y $V_{1,est}$ de potencial estacionario coinciden con sus respectivos análogos exactos en un entorno de las soluciones homogéneas deterministas $\underline{v}^*$.

i) Se demuestra igual que i) en los teoremas 1 y 2.
ii) La demostración sigue los siguientes pasos:

1. Definamos el funcional $\pi^0(\Phi(\underline{r}))$ que es solución de la siguiente ecuación implícita.

$$\int_R d\eta f(\eta) \ll D(U_\eta(\underline{\Phi}(\underline{r}); \underline{K})) \gg \left[\exp\left(\eta\pi^0(\underline{\Phi}(\underline{r}))\right) - 1\right] = 0 \tag{2.53}$$

Por ejemplo, cuando $f(\eta)$ viene dado por (2.52), toma el valor

$$\pi^0(\underline{\Phi}(\underline{r})) = \ln\frac{D_-(\underline{\Phi}(\underline{r})}{D_+(\underline{\Phi}(\underline{r})}, \tag{2.54}$$

donde $D_\pm$ vienen dados por (2.51), con $\eta = 1, -1$ respectivamente. Este funcional tiene una propiedad interesante: sus ceros son solución de la ecuación determinista. Esta propiedad se demuestra fácilmente:
Sea $\underline{v}'$ una solución de $\pi^0(\underline{v}'(\underline{r})) = 0$. Desarrollamos (2.53) alrededor de este cero; conservando sólo el orden dominante en dicho desarrollo, encontramos que $\underline{v}'$ sustituido en el segundo miembro de la ecuación determinista (2.26) lo anula. Es por tanto una solución estacionaria determinista. De hecho, a partir de (2.32) es directo verificar que todas las soluciones homogéneas de la ecuación determinista deben ser ceros de π^0.
Centremos nuestra atención en dichas soluciones homogéneas $\underline{v}^* = \underline{v}_{hom}$.

2. Elijamos los siguientes coeficientes para la ecuación de Fokker-Planck (2.36)

$$\begin{aligned} \Xi_0(\underline{\Phi}(\underline{r})) &= \Xi_0^{exacto}(\underline{\Phi}(\underline{r})) \\ \Xi_1(\underline{\Phi}(\underline{r})) &= 0 \\ \Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r})) &= \frac{\Xi_0^{exacto}(\underline{\Phi}(\underline{r}))}{\pi^0(\underline{\Phi}(\underline{r}))}. \end{aligned} \tag{2.55}$$

Utilizando el desarrollo,

$$\log(x) = \left(\frac{x-1}{x}\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{x-1}{x}\right)^2 + \frac{1}{3}\left(\frac{x-1}{x}\right)^3 + ..., \quad x \geq \frac{1}{2} \tag{2.56}$$

es directo mostrar que el coeficiente Ξ_2 puede desarrollarse en torno a $\underline{v}_{hom}$ como,

$$\Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r})) = Z_2(\underline{\Phi}(\underline{r})) + \frac{Z_3(\underline{\Phi}(\underline{r}))}{Z_2(\underline{\Phi}(\underline{r}))}\Xi_0(\underline{\Phi}(\underline{r})) + O(\Xi_0^2), \tag{2.57}$$

donde

$$Z_n = \frac{1}{n!}\int_{R^d} d\eta f(\eta)\eta^n \ll D(U_\eta(\underline{v}_{hom}; \underline{K})) \gg \tag{2.58}$$

Consecuentemente podemos aplicar el teorema anterior para concluir que la ecuación de Fokker-Planck definida por los coeficientes (2.55) reproduce $V_{0,est}$ localmente en un entorno de $\underline{v}_{hom}$.

3. Para estudiar $V_{1,est}$ hay que seguir un razonamiento simlar al seguido en el teorema anterior. Supongamos que $V_{0,est}^{exacto}$ y $V_{0,est}^{FP}$ son conocidos. Del mismo modo que en (2.43) y (2.45), definimos los hamiltonianos en siguiente orden en Ω, cuya dinámica define los potenciales $V_{1,est}^{exacto}$ y $V_{1,est}^{FP}$, como

$$\begin{aligned} &H_1^{exacto}(\underline{\pi}, \underline{\Phi}) = \\ &-\int_{R^d} d\underline{r} \int_R d\eta f(\eta)\frac{\eta}{2}\left[\frac{\delta}{\delta\Phi(\underline{r})}\left\{\ll D(U_\eta(\underline{\Phi}(\underline{r}); \underline{K})) \gg \left[1 + \exp\left(\eta\frac{\delta V_{0,est}}{\delta\Phi(\underline{r})}\right)\right]\right\}\right. \\ &\left. -2 \ll D(U_\eta(\underline{\Phi}(\underline{r}); \underline{K})) \gg \exp\left(\eta\frac{\delta V_{0,est}}{\delta\Phi(\underline{r})}\right)\pi(\underline{r})\right] \end{aligned} \tag{2.59}$$

y

$$H_1^{FP}(\underline{\pi},\underline{\Phi}) = \int_{R^d} d\underline{r}\left[\frac{\delta\Xi_0(\underline{\Phi}(\underline{r}))}{\delta\Phi(\underline{r})} - \frac{\delta\Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r}))}{\delta\Phi(\underline{r})}\frac{\delta V_{0,t}}{\delta\Phi(\underline{r})}\right.$$
$$\left.-\Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r}))\frac{\delta^2 V_{0,t}}{\delta\Phi(\underline{r})^2} + \left[2\Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r}))\frac{\delta V_{0,t}}{\delta\Phi(\underline{r})} - \Xi_0(\underline{\Phi}(\underline{r}))\right]\pi(\underline{r})\right] \qquad (2.60)$$

respectivamente.
En contraste con los hamiltonianos (2.43) y (2.45), ahora los puntos fijos para los correspondientes sistemas dinámicos hamiltonianos tienen en general momentos no nulos: $N = (\underline{\pi}_{hom}, \underline{v}_{hom})$ y, por lo tanto, deberíamos chequear primero que ambos hamiltonianos llevan a los mismos puntos fijos. Para esto igualamos a cero las ecuaciones de Hamilton asociadas, (2.47). Puede verificarse entonces, que una condición suficiente para tener los mismos puntos fijos es que $Z_3(\underline{v}_{hom}) = 0$. Esta limitación conduce a una forma de $f(\eta)$ como la de la ecuación (2.52).
Finalmente sólo resta desarrollar los hamiltonianos H_1^{exacto} y H_1^{FP} en torno a los puntos fijos, y chequear que hasta segundo orden en el desarrollo en Ω ambos coinciden y, por lo tanto, llevan al mismo potencial $V_{1,est}$. †

Corolario 1 *La distribución estacionaria de la ecuación de Fokker-Planck definida en este último teorema viene dada por una medida de Gibbs cuando* $p(\underline{K}) = \delta(\underline{K} - \underline{K}_0)$.

Demostración:
Es una aplicación directa del teorema 1. De hecho el coeficiente Ξ_2 en (2.55) se reduce a su análogo en (2.39) para esta distribución $p(\underline{K})$. †

Comentarios.
Vamos a dar una idea física de la aproximación involucrada en la construcción de la ecuacion de Fokker-Planck del último teorema.
Tomemos separadamente los términos correspondientes a saltos en cada una de las variables en la ecuación maestra de partida. Aunque, al no cumplirse una condición de balance detallado no podemos garantizar que cada uno de los sumandos anteriores se anule separadamente, la aproximación consiste en suponerlos iguales a cero para construir una ecuación de Fokker-Planck . El conjunto de igualdades así obtenido genera, una ecuación para $\partial V_0/\partial\Phi(\underline{r})$, y cada valor de $\underline{r}$, es decir, para cada una de las *fuerzas termodinámicas*. Para definir una ecuación de Fokker-Planck podemos suponer, del mismo modo que en la ecuación maestra, que se cumple una condición de balance detallado [13] e imponer que las fuerzas termodinámicas tengan la misma forma que se ha derivado de la ecuación maestra. Esta aproximación lleva a la ecuación definida por

[13] Balance detallado se traduce en *potencialidad*, en el lenguaje de las ecuaciones contínuas. Véase al apéndice C.

(2.55). Obviamente, cuando se cumple la condición de balance detallado la aproximación es exacta, como ya hemos demostrado. Es importante notar que, aunque para construir la ecuación de Fokker-Planck hemos trabajado con las fuerzas termodinámicas definidas por la hipótesis de balance detallado, las fuerzas termodinámicas que posteriormente puedan derivarse como solución de la ecuación Fokker-Planck no coincidirán con estas. Las fuerzas termodinámicas obtenidas con balance detallado se utilizan como una herramienta para construir la ecuación de Fokker-Planck y sólo aparecen en un estadio intermedio de cálculo,.

Así pues, la ecuación de Fokker-Planck construida para este segundo teorema cumple todos los requisitos que impusimos a priori, esto es:

- Depende explícitamente de las funciones D.
- Reproduce la dinámica determinita de forma exacta.
- En el límite de equilibrio su solución estacionaria es una medida de Gibbs.
- En un entorno de los extremales de la distribución de probabilidad reproduce los dos primeros órdenes en Ω del potencial de no equilibrio.

2.2.3 El método en campo medio.

Queremos hacer simplemente un comentario, sobre la aplicabilidad del método que hemos introducido para construir ecuaciones de Fokker-Planck en problemas de campo medio. Anteriormente hemos considerado sistemas con un contínuo de grados de libertad, es decir, campos. Sin embargo, dicho requisito no es esencial para aplicar el método anterior. El único punto fundamental que se debe respetar es la presencia de un factor global Ω, en el hamiltoniano de interacción, que sea el parámetro natural para desarrollos ulteriores. Este requisito se cumple para hamiltonianos de campo medio. En este tipo de hamiltonianos, aparece un número finito de variables; si las notamos q_i la ecuación de Fokker-Planck que hemos propuesto, (2.36), (2.55), queda;

$$\begin{aligned}\partial_t P_t(\underline{q}) &= \frac{1}{2\Omega}\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial}{\partial q_i}\Bigg(\left[W(-U_i(\underline{q}))-W(U_i(\underline{q}))\right]P_t(\underline{q}) \\ &\quad +\sum_{j=1}^{n}\frac{W(-U_i(\underline{q}))-W(U_i(\underline{q}))}{\log\left[\dfrac{W(-U_i(\underline{q}))}{W(U_i((\underline{q}))}\right]}\frac{\partial}{\partial q_j}P_t(\underline{q})\Bigg)\end{aligned} \tag{2.61}$$

siendo ahora

$$W(\pm U_i(\underline{q})) = \int_{R^n} d\underline{K}p(K)w(q_i \to q_i \pm 1\,;\underline{K}) \tag{2.62}$$

siendo $w(q_i \rightarrow q_i \pm; \underline{K})$ las probabilidades de transición asociadas a un hamiltoniano de campo medio, $H_{cm}(\underline{q})$ definido por el conjunto de parámetros $\underline{K}$, y $U_i(\underline{q}) = \partial H_{cm}(\underline{q})/\partial q_i$ [14].

[14] Nótese que consideramos en las probabilidades de transición que las distintas variables q_i evolucionan de forma independiente.

Capítulo 3

Potenciales estacionarios de no equilibrio.

En los capítulos precedentes hemos definido modelos de no equilibrio, y hemos visto una posible caracterización de los mismos en términos de ecuaciones de Fokker-Planck. Nuestro objetivo en el presente capítulo es doble, por un lado pretendemos realizar un test al modelado de Fokker-Planck introducido en el capítulo anterior, y, por otro, calcular explícitamente un potencial estacionario de no equilibrio para algún modelo sencillo [133]. Motivemos un poco más estos objetivos:

1. La forma de modelar una ecuación maestra mediante una de Fokker-Planck que hemos introducido, tiene ciertas virtudes que se han demostrado explícitamente. Entre ellas está la de reproducir de forma exacta los dos primeros órdenes del potencial estacionario en un entorno de cada uno de los extremos de la distribución de probabilidad. Por tanto, las propiedades locales que se deriven de ella, como, por ejemplo, la ubicación de los extremos del potencial estacionario o las fluctuaciones en torno a los mismos serán reproducidas de forma exacta.
   En el caso de que se cumpla una condición de balance detallado no sólo las propiedades locales anteriores se reproducen de forma exacta, sino tambien, siguiendo el teorema 1 del capítulo anterior, las propiedades que dependan de la forma global del potencial estacionario. [1].

[1]Supongamos un sistema definido por una ecuación maestra que cumple la condición de balance detallado. En el límite $\Omega \to \infty$ puede calcularse su espectro de autovalores completo [116, 69]. Mientras que la solución estacionaria viene dada por el autoestado con autovalor cero del operador que define la ecuación maestra [89, 116], el comportamiento dinámico se ve afectado por los restantes autovalores. En este contexto, Hanggi *et al.* demostraron [69] que la ecuación de Fokker-Planck dada por el teorema 1, reproduce no sólo la solución estacionaria, sino también las propiedades dinámicas como tiempos de paso, para grandes valores de Ω. Queremos resaltar el hecho de que las propiedades dinámicas, a pesar de depender de todo el conjunto de autovalores, están condicionadas fuertemente por la autofunción de autovalor cero. Así, por ejemplo, el tiempo de paso entre dos mínimos del potencial estacionario es proporcional a la diferencia de probabilidades estacionarias entre ambos mínimos, y en el limite

Es deseable, por tanto, chequear qué tales resultados da el modelado de Fokker-Planck en zonas alejadas de los extremos del potencial, donde, en situaciones genéricas, sin balance detallado, no se tiene garantizada su validez.

2. Puesto que queremos analizar las diferencias entre el potencial estacionario de una ecuación maestra y el de la Fokker-Planck correspondiente, hemos de introducir un método para calcular explícitamente dichos potenciales. Tal método fue desarrollado por Graham *et al.*[56, 57, 58, 59, 60, 85], y a través de él se llega de forma natural a la *no diferenciabilidad de los potenciales de no equilibrio*. El estudio de potenciales de este tipo es interesante por sí mismo; se utiliza, por ejemplo, en el análisis de la estabilidad de sistemas dinámicos [35], o para la construcción de medidas invariantes en atractores extraños [150].

Para trabajar de la forma más sencilla posible, y poder presentar explícitamente los resultados, consideraremos un modelo caracterizado por dos grados de libertad [2]. Se trata de un modelo de competición de dos dinámicas, una ferromagnética y otra antiferromagnética, en campo medio, cuyo comportamiento ha sido analizado previamente como prototipo de modelo de no equilibrio dependiente fuertemente de la forma de la dinámica microscópica [129]. Este modelo es lo suficientemente simple como para ser resuelto explícitamente, y al tiempo, lo suficientemente rico como para presentar, por ejemplo, cambios de fase o atractores deterministas coexistentes.
El esquema que seguimos es:

- Definimos el modelo y mostramos de forma resumida su comportamiento determinista.
- Calculamos explícitamente su potencial estacionario asociado.
- Consideramos la representación del modelo en términos de diferentes tipos de ecuaciones de Fokker-Planck , y para cada una de ellas calculamos el potencial estacionario asociado. En particular, consideraremos la ecuaciones de Fokker-Planck de van Kampen, Kramers-moyal, con coeficiente de difudión constante, y la introducida por nosotros.
- Comparamos los distintos potenciales con el exacto. Comprobaremos que la Fokker-Planck introducida en el capítulo anterior genera un potencial con mucha más precisión que cualquiera de las restantes ecuaciones consideradas.

$\Omega \to \infty$ coincide con dicha diferencia [71]. Consecuentemente, conseguir una correcta caracterización del estado estacionario es el primer requisito para estudiar comportamientos dinámicos. Cuando, a partir de ahora, calculemos la forma global del potencial, y relacionemos dicha forma con propiedades dinámicas del sistema, lo haremos en este sentido.

[2] Si hubiese sólo un grado de libertad, se cumpliría la condición de potencialidad, (véase el apéndice C) y el problema sería exactamente resoluble.

3.1 Definición del modelo

Al igual que en los capítulos anteriores, consideremos un modelo con variables de espín, s_x, definidas sobre cada uno de los nudos $\underline{x}$ de un retículo Λ. Sea $\underline{s}$ una cierta configuración y $\underline{s}^x$ la configuración $\underline{s}$ con el espín en la posición $\underline{x}$ cambiado de signo. La ecuación maestra que define el modelo puede escribirse como

$$\frac{\partial}{\partial \tau} P_t(\underline{s}) = \sum_{\underline{x} \in \Lambda} [w(\underline{s}^x \to \underline{s}) P_t(\underline{s}^x) - w(\underline{s} \to \underline{s}^x) P_t(\underline{s})] \tag{3.1}$$

donde $w(\underline{s} \to \underline{s}')$ es la probabilidad de transición de ir de $\underline{s}$ a $\underline{s}'$. Las probabilidades de transición se definen como

$$w(\underline{s} \to \underline{s}') = pD(H_1(\underline{s}') - H_1(\underline{s})) + (1-p)D(H_2(\underline{s}') - H_2(\underline{s})) \tag{3.2}$$

donde $p \in [0,1]$ da la probabilidad relativa entre los dos mecanismos, y la función D cumple las propiedades (1.8). Obviamente, cuando $p = 1(0)$, la solución estacionaria viene dada por una medida de Gibbs con respecto al hamiltoniano $H_{1(2)}(\underline{s})$. Sean H_1 y H_2 los hamiltonianos ferromagnético y antiferromagnético de Ising en campo medio, respectivamente

$$H_{1(2)}(\underline{s}) = -2\Omega K m^2_{F(A)}(\underline{s}) \tag{3.3}$$

donde $K = J/T$), siendo T la temperatura, 2Ω el número total de nudos,

$$m_{F(A)}(\underline{s}) = \frac{1}{2\Omega} \sum_{\underline{x} \in \Lambda_1} s_x + (-)\frac{1}{2\Omega} \sum_{\underline{x} \in \Lambda_2} s_x \tag{3.4}$$

son los parámetros de orden ferromagnético y antiferromagnético respectivamente, y $\Lambda_{1,2}$ son dos subredes interpenetradas con Ω nudos cada una.
Es posible resumar en la ecuación maestra todas las configuraciones con iguales valores de las magnetizaciones en ambas subredes o, lo que es lo mismo, con iguales valores de m_F y m_A. Para ello definimos previamente

$$Q_t(m_F, m_A) = \sum_{\underline{s}} \delta(m_F - m_F(\underline{s}))\delta(m_A - m_A(\underline{s}))P_t(\underline{s}) \tag{3.5}$$

que no es más que la probabilidad conjunta de tener una configuración especificada por m_F y m_A. Tomando la derivada parcial respecto al tiempo en (3.5) y usando la ecuación maestra (3.1) así como las ecuaciones (3.2)- (3.4), se tiene,

$$\frac{\partial}{\partial t} Q_t(m_F, m_A) =$$
$$\sum_{\mu_F = \pm 1} \sum_{\mu_A = \pm 1} \left[c\left(\mu_F, \mu_A; m_F + \frac{\mu_F}{\Omega}; \frac{\mu_A}{\Omega}, \frac{2}{\Omega}\right) Q_t\left(m_F + \frac{\mu_F}{\Omega}, m_A + \frac{\mu_A}{\Omega}\right) \right.$$
$$\left. - c(\mu_F, \mu_A; m_F, m_A, 0) Q_t(m_F, m_A) \right] \tag{3.6}$$

donde

$$c(\mu_F,\mu_A;m_F,m_A,\Delta)=\frac{\Omega}{2}(1+\mu_F m_F+\mu_A m_A+\Delta)$$
$$\left\{p\,D\left[2K\left(2m_F\mu_F+\Delta-\frac{1}{\Omega}\right)\right]+(1-p)\,D\left[2K\left(2m_A\mu_A+\Delta-\frac{1}{\Omega}\right)\right]\right\} \quad (3.7)$$

En los caso límite $p=1(0)$ la ecuación maestra (3.6) tiene, por construcción, la siguiente solución estacionaria de equilibrio:

$$Qest(m_F,m_A)=\left(\begin{array}{c}\Omega\\ \frac{\Omega}{2}(1+m_F+m_A)\end{array}\right)\left(\begin{array}{c}\Omega\\ \frac{\Omega}{2}(1+m_F-m_A)\end{array}\right)\exp(2\Omega K m^2_{F(A)}) \quad (3.8)$$

donde los factores combinatoriales provienen de considerar en cada una de las subredes todas las configuraciones de espines dando lugar a un mismo valor de los parámetros de orden. Sólo en este caso podemos expresar la solución estacionaria como una medida de Gibbs, para valores de p intermedios no es posible especificar la solución de este modo [3].

3.2 Comportamiento determinista.

El el límite determinista, $\Omega\to\infty$, en el que las fluctuaciones son ignoradas completamente la ecuación maestra (3.6) se reduce a

$$\frac{dv_Y}{dt}=A_Y(v_F,v_A)\equiv\sum_{\mu_F,\mu_A=\pm1}\mu_Y c_0(\mu_F,\mu_A;m_F,m_A) \quad (3.9)$$

donde el subíndice Y, a partir a ahora, simboliza a F o a A, y v_Y y $c_0(\mu_F,\mu_A;m_F,m_A)$ son los términos dominantes al desarrollar en potencias de Ω los parámetros de orden, m_Y, y las probabilidades de transición, (3.7), respectivamente.
Debido a la invariancia de las ecuaciones ante la transformación $v_Y\to -v_Y$, en lo sucesivo *nos limitaremos a considerar valores positivos de los parámetros de orden.*
Un estado estacionario determinista, $\underline{v}_{est}\equiv(v_F^*,v_A^*)$ es una solución de (3.9) igualada a cero. Su comportamiento es claramente dependiente de la función D que se considere; no obstante algunas propiedades generales pueden demostrarse independientemente del tipo de probabilides de transición considerado:

- Para el límite de temperatura infinita, $T\to\infty$, hay una única solución, $(0,0)$, que es estable ante perturbaciones para

$$T\geq T_c^{(1)}(p)\equiv 2\ \max\{p,1-p\} \quad (3.10)$$

[3] Exceptuando $p=1/2$, valor para el que puede encontrarse un hamiltoniano efectivo, del mismo modo que se vió en el primer capítulo

- $T_c^{(1)}(p)$ es la temperatura crítica para un cambio de fase de segundo orden, con exponentes críticos clásicos,

$$v_F \approx A(T_c^{(1)}(p) - T)^{1/2}, \quad A^{-2} = 4p\left(24\, p\, \frac{\partial^2 D(\lambda)}{\partial \lambda^2}\bigg|_{\lambda=0} - 1\right). \tag{3.11}$$

- $v_F + v_A = 1$ cuando $T = 0$ y $v_F, v_A \neq 0$.

La estructura de $\underline{v}_{est}$ por debajo de $T_c^{(1)}(p)$ no es trivial, y depende fuertemente del tipo de función D considerado. En la referencia [129], presentamos una descripción comparada del comportamiento de este modelo para distintos tipos de dinámicas. Aquí nos vamos a centrar en el estudio de una de ellas: $D(\lambda) = \exp(-\lambda/2)$.
Para este tipo de probabilidades de transición existe una segunda temperatura crítica $T_c^{(2)}(p) < T_c^{(1)}(p)$, correspondiente a un segunda ruptura espontóntanea de simetría, definida por,

$$T_c^{(2)}(p) = \frac{2}{1 + \dfrac{(1-p)}{p}\cosh(x)} \tag{3.12}$$

donde x es una solución de la ecuación implícita siguiente,

$$px = (1-p)\sinh(x). \tag{3.13}$$

En el intervalo $[T_c^{(2)}(p), T_c^{(1)}(p)]$ las soluciones localmente estables son de la forma $\underline{v}est = (v_F, 0)$ para $p > 1/2$ y, $\underline{v}_{est} = (0, v_A)$ para $p < 1/2$. Por debajo de $T_c^{(2)}(p)$ se tiene coexistencia de dos soluciones localmente estables, $\underline{v}_{est}^{(1)} = (v_F^*, 0)$ y $\underline{v}_{est}^{(2)} = (0, v_A^*)$. La estructura de las soluciones estacionarias en función de los parámetros se muestra en la figura (3.1) En las figuras (3.2) y (3.2), se representa el comportamiento de las soluciones en función de la temperatura para $p = 0.8$ fijo, y en función de p para diferentes temperaturas, respectivamente. Nótese, por ejemplo, que $\underline{v}_{est}^{(2)}$ aparece en una forma discontínua, característica de ls transiciones de fase de primer orden. Otra propiedad, sorprendente *a priori*, es que $|\underline{v}_{est}^{(1)}|$ y $|\underline{v}_{est}^{(2)}|$ tienden a 1 cuando $T \to 0$, para todo p en el intervalo $[1/2, 1)$. Esto es, a bajas temperaturas es posible encontrar al sistema en un estado antiferromagnético puro para $p \approx 1$ (un mecanismo dinámico casi puramente ferromagnético), lo cual va contra toda intuición físisca. Es de suponer que estos estados serán *estados metaestables*, es decir, estados localmente estables, pero que en presencia de fluctuaciones más allá de la aproximación lineal perderán su estabilidad, decayendo al verdadero estado estable. Sin embargo, por el momento no podemos demostrar esta conjetura. En la figura (3.2) se representan las lineas de flujo deterministas para unos valores concretos de los parámetros, para los que dos puntos fijos estables coexisten, cada uno con un dominio de atracción bien definido. Nótese que el flujo determinista no da ningún tipo de información sobre la posible metaestabilidad de los puntos fijos asociados.

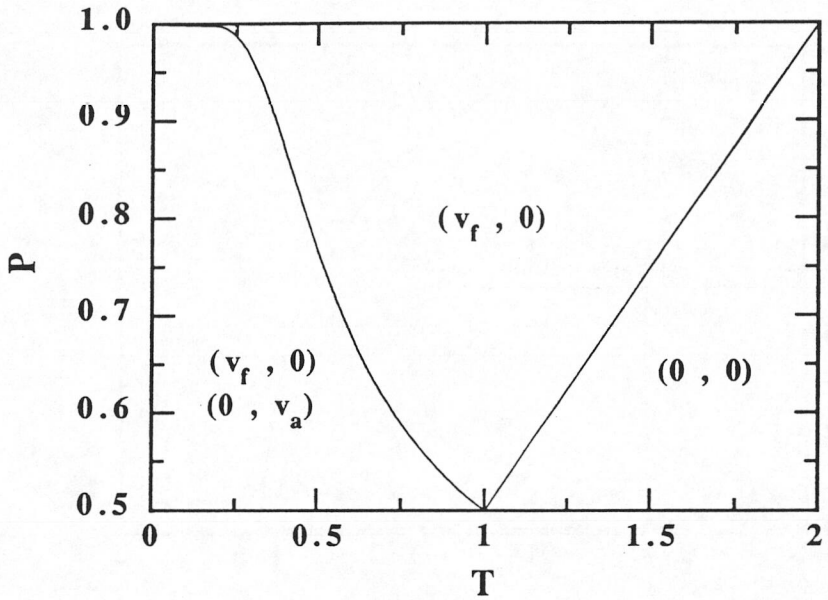


Figura 3.1: Estructura de los estados estacionarios deterministas.

3.3 Potencial estacionario de no equilibrio.

Supongamos que la ecuación maestra admite una única solución estacionaria, que en el límite de bajo ruido, $\Omega \to \infty$, puede escribirse en la forma asintótica,

$$Q_{est}(v_F, v_A) = C \exp\left[-\Omega V_0(v_F, v_A) - \Theta(\Omega^0)\right]. \tag{3.14}$$

Nuestro objetivo, como se ha dicho, es determinar explícitamente V_0.

Algunas consideraciones matemáticas.

- La hipótesis sobre la forma asintótica de la probabilidad estacionaria puede demostrarse que es correcta bajo condiciones muy generales [35].
- Puede probarse que, en general, el potencial de no equilibrio no es diferenciable. Vease, por ejemplo, la demostración de Jauslin haciendo uso del criterio de Melnikov. Vease al respecto [86, 87] y las referencias allí citadas.
- Aunque el potencial V_0 no sea diferenciable en todo el espacio sobre el que está definido, no es arbitrariamente irregular. En esta dirección, existen los siguientes resultados destacables:

  1. Tel, Graham y Gang, demostraron que en un entorno de los mínimos de dicho potencial, éste es siempre diferenciable [159, 39, 40].

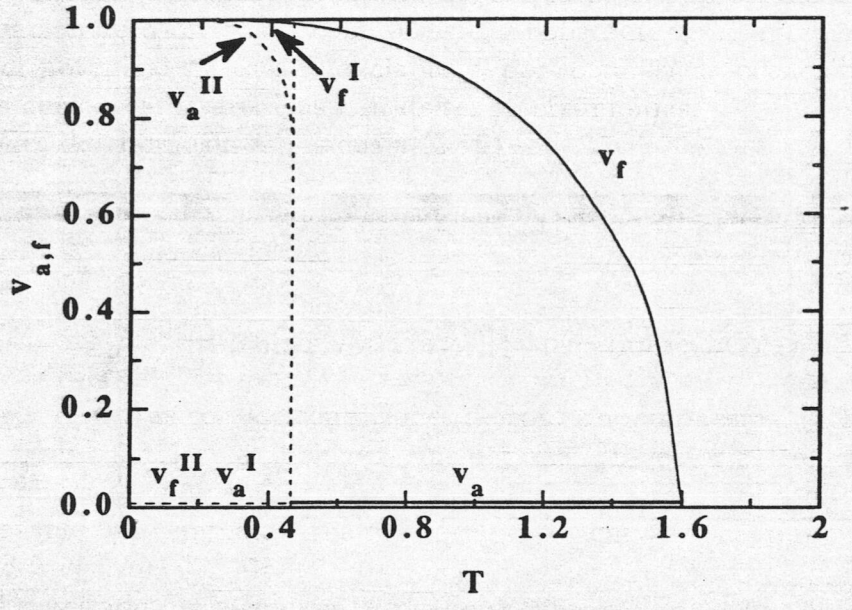


Figura 3.2: Diagrama de las fases para $v_F(A)$ frente a T para $p = 0.8$.

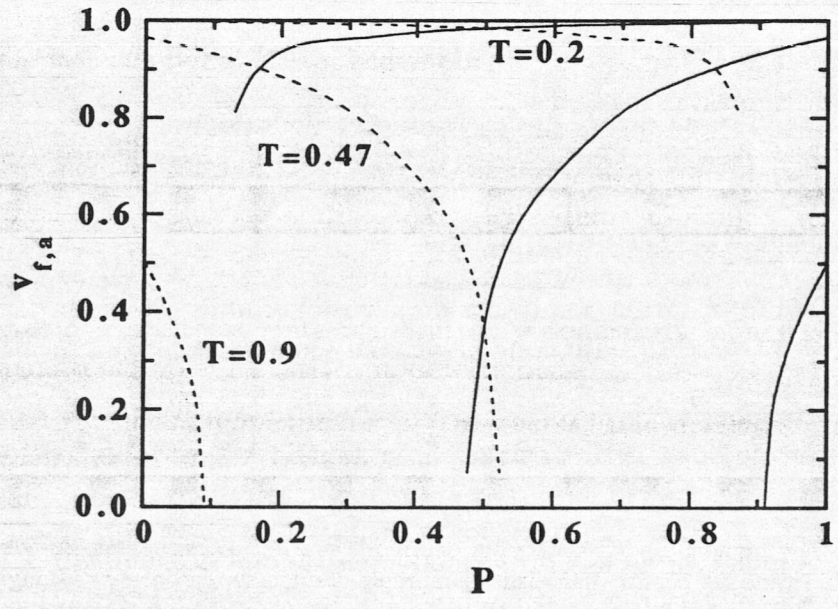


Figura 3.3: Diagrama de las fases para $v_F(A)$ frente a p para diferentes temperaturas.

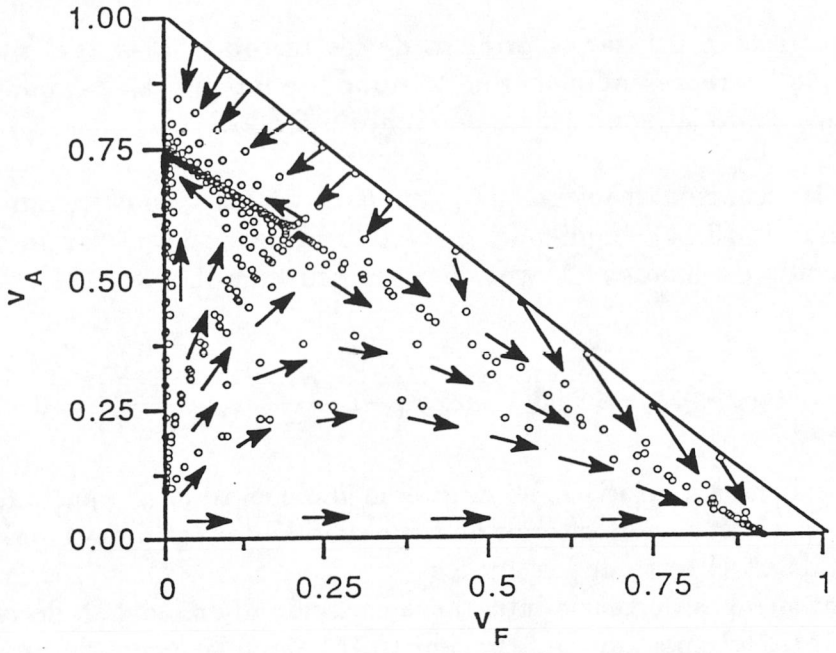


Figura 3.4: Flujo dinámico determinista para $p = 0.6$ y $T < T_c^{(2)}$.

2. El potencial V_0 sastisface una condición de Lipshitz local [35], lo que implica que es diferenciable casi por doquier.

3. Apoyándose en la antes mencionada condición de Lipshitz y mostrando que el potencial decrece a lo largo de las trayectorias deterministas, Jauslin demostró que V_O es una función de Lyapunov para la evolución determinista [73]. Esto justifica la consideración de los potenciales asociados a la solución estacionaria de una ecuación de Fokker-Planck , como una extensión de los potenciales termodinámicos de equilibrio a situaciones más generales.

Hechas estas apreciaciones, veamos cómo proceder para determinar explícitamente el potencial.

3.3.1 Método de construcción de potenciales: consideraciones generales.

Existen dos planteamientos teóricos diferentes para calcular el potencial V_0.

1. La primera posibilidad consiste en sustituir la expresión propuesta para la solución estacionaria en la ecuación de partida, y analizar la ecuación resultante hasta el primer orden en Ω.

2. La segunda alternativa se basa en considerar la representación en términos de integrales de camino de la ecuación de partida, y aplicar un principio extremal a la acción asociada, considerando el primer orden en Ω.

En este apartado vamos a utilizar el primero de los métodos. Más adelante, cuando hayamos introducido las representaciones en términos de integrales de camino haremos algunos comentarios sobre la equivalencia de ambos métodos.

Consideremos la ecuación maestra (3.6) igualada a cero, y sustituyamos en ella la solución estacionaria (3.14). Siguiendo el método utilizado en el capítulo anterior, hagamos un desarrollo de Kramers-Moyal de dicha ecuación [89, 94, 127]; en el orden más bajo queda,

$$\sum_{\mu_F,\mu_A=\pm 1} c_0(\mu_F,\mu_A;v_F,v_A)\left[1-\exp\left(-\mu_F\frac{\partial V_0}{v_F}-\mu_A\frac{\partial V_0}{v_A}\right)\right]=0 \qquad (3.15)$$

Puesto que, como sabemos a priori, V_0 no es diferenciable en todo el espacio de configuración, es evidente que la ecuación anterior no tiene sentido donde no haya derivabilidad, estando bien definida en el resto de los puntos.
Para calcular el potencial es necesario integrar la ecuación diferencial en derivadas parciales anterior (3.15). Notemos que la ecuación (3.15) tiene la forma de una ecuación de Hamilton-Jacobi que, en forma genérica puede escribirse como,

$$H\left(v_F,v_A,\frac{\partial V_0}{v_F},\frac{\partial V_0}{v_A}\right)=0 \qquad (3.16)$$

donde la función H puede ser identificada como un hamiltoniano. En ese caso, las derivadas parciales del potencial se corresponden con las variables canónicamente conjugadas de las coordenadas (magnetizaciones), es decir,

$$p_Y=\frac{\partial V_0}{v_Y}\,, \qquad Y=F,A \qquad (3.17)$$

y finalmente, $V_0(v_F,v_A)$ se identifica ahora con la acción (o *función principal de Hamilton*; véase [38, 66, 7]) del análogo mecánico. Nuevamente queremos subrayar el hecho de que la igualdad (3.17) sólo está bien definida allí donde el potencial es diferenciable. De este modo hemos establecido una correspondencia que nos permite traducir el problema de calcular el potencial estacionario de una ecuación maestra, a un problema típico de mecánica clásica, coincidiendo el potencial, en el límite de bajo ruido, con la función principal de Hamilton asociada a la ecuación de Hamilton Jacobi (3.15).

Para tener el problema completamente definido, hemos de fijar unas condiciones de contorno. Elegimos como tales:

$$\left.\frac{\partial V_0}{v_Y}\right|_{v_Y=v_Y^*}=0 \qquad (3.18)$$

de modo que garantizamos, a través de (3.17), que el potencial será extremal en los puntos fijos de la evolución determinista. En particular, en los puntos fijos estables

(atractores) el potencial presentará mínimos locales, en los puntos fijos inestables (repelores) tendrá máximos, y tendrá puntos silla sobre los puntos fijos hiperbólicos [4].
En la resolución de (3.15) pueden, *a priori*, presentarse dos situaciones diferentes:[59]

1. Si es posible encontrar una constante de movimiento adicional, además del hamiltoniano, entonces el problema es *integrable* y existe una solución $V_0(v_F, v_A)$ monovaluada, dos veces contínua y diferenciable [38, 7].
   Nótese, en particular, que cuando se cumple una condición de balance detallado, ésta garantiza que existen tantas constantes del movimiento como grados de libertad tiene el sistema y, por tanto, garantiza la integrabilidad de los sistemas en equilibrio. Consecuentemente nuestro modelo es integrable en los caso límites $p = 0$ y $p = 1$. Es directo comprobar que en dichos casos, la distribución dada por (3.8) es solución de la ecuación de Hamilton Jacobi . Hay otro valor de los parámetros para el que el sistema es también integrable: $p = 1/2$. En este caso se cumple también una condición de balance detallado respecto de un hamiltoniano efectivo. Este puede calcularse de forma análoga al hamiltoniano efectivo calculado en el primer capítulo.
   Nótese que no se requiere la completa integrabilidad del sistema para poder garantizar la existencia de una solución bien comportada: es condición suficiente que exista una constante del movimiento adicional en la variedad invariante definida por $H = 0$. De hecho, en [60], se resuelve explícitamenete una ecuación de Hamilton Jacobi encontrando una constante del movimiento adicional, que sólo es constante en la variedad de energía constante igual a cero.

2. Para $p \in]0, 1/2[\cup]1/2, 1[$, no se cumple una propiedad de balance detallado. Hasta donde sabemos, no existe un método general de amplia aplicabilidad que nos permita garantizar la no existencia de constantes adicionales del movimiento [59, 60]. Pero, independientemente de que el problema sea integrable o no, mientras no sepamos cómo calcular explícitamente las hipotéticas constantes del movimiento adicionales, es necesario recurrir a métodos numéricos para resolver nuestro problema mecánico (3.16). Esto es precisamente lo que haremos.

Toda ecuación diferencial en derivadas parciales es matemáticamente equivalente al conjunto de ecuaciones que definen sus curvas características [153]. O dicho en el lenguaje de la mecánica, resolver una ecuación de Hamilton Jacobi es equivalente a resolver las ecuaciones de Hamilton que se derivan de ella, que son las ecuaciones diferenciales de primer orden que definen sus curvas características asociadas (véase apéndice D, y/o [38, 7, 32]).

[4] Dado un cierto sistema dinámico, un punto fijo del mismo se dice hiperbólico, o punto de silla, si la matriz que representa la dinámica linealizada en torno a él, tiene autovalores tanto positivos como negativos; si todos son negativos se trata de un punto fijo estable, y si son positivos, inestable [145, 73, 72].

Podemos, pues, aplicar el método de las curvas características o de Cauchy, para resolver la ecuación de Hamilton Jacobi . Existe, no obstante una limitación: en los puntos en los que el potencial no es diferenciable y, por lo tanto, la ecuación (3.16) no está definida, las curvas características han de ser interrumpidas.
Las ecuaciones de Hamilton asociadas a (3.16) son,

$$\frac{dv_Y}{dt} = \sum_{\mu_F,\mu_A=\pm 1} \mu_Y c_0(\mu_F,\mu_A;v_F,v_A)\exp(-\mu_F p_F - \mu_A p_A) \tag{3.19}$$

y

$$\frac{dp_Y}{dt} = \sum_{\mu_F,\mu_A=\pm 1} \frac{\partial}{\partial v_Y}[c_0(\mu_F,\mu_A;v_F,v_A)]\,[\exp(-\mu_F p_F - \mu_A p_A) - 1]\,, \tag{3.20}$$

que han de ser resueltas con las condiciones de contorno impuestas, (3.18). Para garantizr que se cumplan tales condiciones consideramos trayectorias solución de (3.19) y (3.20), tales que su evolución hacia atrás en el tiempo lleve en el límite $t \to -\infty$ a un punto fijo estable determinista. Cualquiera de estas curvas característica yacerá sobre una variedad invariante [72, 152] [5].
Siguiendo el resultado del apéndice D, puede escribirse

$$V_0^{(i)}(v_F,v_A) = \sum_{Y=F,A} \int dv_Y p_Y + C_i. \tag{3.21}$$

a lo largo de las curvas solución de (3.19) y (3.20), y siendo las constantes de integración C_i diferentes, en general, para cada posible condición inicial considerada, $\underline{v}_i^*$.

Consideremos por un momento, la dinámica determinista del sistema. Es directo comprobar que las ecuaciones (3.9) pueden obtenerse a partir de (3.19) y (3.20), sin más que fijar $p_F = 0$ y $p_A = 0$. De hecho, la envolvente de las curvas deterministas define la variedad invariante bidimensional estable, de cada uno de los puntos fijos, constituyendo una única superficie suave que pasa por todos los puntos fijos deterministas. De este modo, las curvas deterministas son solución del sistema dinámico definido por (3.19) y (3.20), con $V_0(v_F,v_A) = cte = 0$. Se trata de una solución trivial y espúrea que descartamos.
Las trayectorias que interesan para construir el potencial son aquellas que yacen en la variedad invariante complementaria a la determinista:

Teorema 1 *La variedad complementaria (transversa) a la determista en un punto fijo estable (inestable) es inestable (estable).*

[5] Consideremos un determinado sistema dinámico, un punto fijo del mismo, y el conjunto de todos los vectores tangentes (o vectores velocidad) definidos sobre dicho punto, y construidos como combinaciones lineales de autovectores de la dinámica linealizada en el punto fijo, siendo todos los autovalores asociados del mismo signo. Se denomina variedad invariante estable (inestable) a aquella subvariedad del espacio de las fases formada por trayectorias que pasan por el punto fijo con un determinado vector derivada, pudiendo expresarse éste como combinación lineal de autovectores con autovalor asociado negativo (positivo).

Demostración:
Sea un cierto sistema dinámico caracterizado por el siguiente hamiltoniano cuadrático en los momentos [6]

$$H(\underline{q},\underline{p}) = \sum_{i=1}^{n} p_i \left[F_i(\underline{q}) + \frac{1}{2} \sum_{=1}^{n} K_{ij} p_j \right]. \tag{3.22}$$

Las ecuaciones de Hamilton asociadas son,

$$\dot{q}_i = F_i(\underline{q}) + \sum_j K_{ij} p_j \tag{3.23}$$

$$\dot{p}_i = -\sum_{l=1}^{n} p_l \left[F_{l,i}(\underline{q}) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n} K_{lj,i} p_j \right] \tag{3.24}$$

donde $F_{l,i} = \frac{\partial F_l}{\partial q_i}$ y $K_{lj,i} = \frac{\partial K_{lj}}{\partial q_i}$.
Consideremos $p_i = 0 \; \forall \, i$, (3.24) se reduce a:

$$\dot{q}_i = F_i(\underline{q}) \tag{3.25}$$

$$\dot{p}_i = 0 \tag{3.26}$$

de donde, los momentos son todos constantes iguales a cero, y las coordenadas evolucionan *determinístamente.*
Sea $\underline{q}^*$ un punto fijo de la evolución determinista. Linealicemos la dinámica (3.26) en torno a él. La ecuación matricial asociada es,

$$\dot{\underline{v}} = D\hat{F}(\underline{q}^*)\underline{q} \tag{3.27}$$

siendo $D\hat{F}$ la matriz formada por elementos $\frac{\partial F_i}{\partial q_j}$. Como el hamiltoniano es contínuo y con derivada contínua, es consecuencia directa del teorema de Schwartz que $D\hat{F}$ es simétrica y, por tanto, diagonalizable. Así pues, existe una cierta matriz de cambio de base $\hat{M}$ tal que

$$\hat{G} = \hat{M}^{-1} D\hat{F} \hat{M} \tag{3.28}$$

es diagonal.
Volvamos a la dinámmica completa (3.24). Linealicemos en torno al punto dado por $(\underline{q}^*, \underline{0})$. La matriz que define la dinámica linealizada es,

$$\hat{L} \equiv \begin{pmatrix} D\hat{F} & \hat{K} \\ \hat{O} & D\hat{F} \end{pmatrix} \tag{3.29}$$

siendo $\hat{K}$ la matriz formada por elementos K_{ij}, y $\hat{O}$ es una matriz nula $n * n$.
Consideremos la siguiente matriz

$$\hat{D} \equiv \begin{pmatrix} \hat{M} & \hat{O} \\ \hat{O} & \hat{M} \end{pmatrix} \tag{3.30}$$

[6] La generalización del teorema para incluir términos cúbicos y de órdenes superiores en los momentos es directa, pues estos no añaden ninguna contribución al linealizar las ecuaciones dinámicas.

y su inversa

$$\hat{D}^{-1} = \begin{pmatrix} \hat{M}^{-1} & \hat{O} \\ \hat{O} & \hat{M}^{-1} \end{pmatrix} \tag{3.31}$$

la matriz $\hat{A}$ expresada en la base en que $D\hat{F}$ es diagonal es, $\hat{B} = \hat{D}^{-1}\hat{A}\hat{D}$, y viene dada por

$$\hat{N} = \begin{pmatrix} \hat{G}^{-1} & \hat{M}^{-1}\hat{K}\hat{M} \\ \hat{O} & -\hat{G} \end{pmatrix} \tag{3.32}$$

Calculemos los autovalores asociados a $\hat{N}$. Sin más que desarrollar por menores adjuntos (3.32) se obtiene la condición para los autovalores λ siguiente:

$$\det(\hat{N} - \lambda\hat{I}) = \prod_{i=1}^{2n}(\lambda - \lambda_i) = 0 \tag{3.33}$$

donde $\hat{I}$ es la matriz identidad $2n * 2n$ y

$$\lambda_i = \begin{cases} \textit{iésimo autovalor determinista}, & i = 1,\ 2, ..., n \\ \textit{((i - n)ésimo) autovalor determinista} & \\ \textit{cambiado de signo}; & i = n+1,\ n+2, ..., 2n \end{cases} \tag{3.34}$$

Consecuentemente, si el punto fijo determinista es estable, los autovalores nuevos, que no aparecían en la dinámica determinista, son todos positivos, y el teorema queda demostrado. †

A la variedad inestable asociada a un cierto punto fijo, se le suele denominar *separatriz* de dicho punto fijo [73]. Así pues, para evaluar el potencial calcularemos la separatriz de cada uno de los puntos fijos estables.
Es un hecho conocido que el conjunto de separatrices asociadas cada uno de los puntos fijos de un cierto sistema dinámico se unen de forma contínua y diferenciable, formando una única superficie bien definida, si y sólo si el sistema es integrable, siendo esta propiedad estructuralmente inestable ante perturbaciones. Así pues para sistemas no integrables, las distintas separatrices no se unen de forma suave [59, 60] [7].

[7] De hecho, es característica de sistemas no integrables la aparición de ***puntos heteroclínicos***, esto es, puntos en que las variedades estable e inestable de un cierto punto fijo se intersectan de forma no diferenciable. Los puntos heteroclínicos inducen enormes oscilaciones en la separatriz, y de hecho aparecen ligadas al origen del caos en sistemas hamiltonianos [72, 66].

3.3.2 Método de construcción de potenciales: cálculo explícito.

Para ser más concisos, y sin perder generalidad, vamos a considerar un conjunto particular de valores para los parámetros, en concreto tomamos: $p = 0.6$ y $K = 3$, que corresponde a la situación más interesante en la que dos atractores deterministas coexisten. El flujo determinista asociado es el que se ha representado en la figura (3.2).
Para integrar numéricamente el sistema de cuatro ecuaciones diferenciales (3.19), (3.20), hemos considerado un algoritmo de Rungge-Kutta de cuarto orden [93]. Trabajando con incrementos temporales suficientemente pequeños, la energía se conserva hasta el orden de magnitud que prefijamos (cuatro cifras decimales), por lo tanto, no se requiere en este caso un método más elaborado de resolución numérica que conserve explícitamente la energía, como puede ser un algoritmo simpléctico [86].
El procedimiento es el siguiente:

1. Fijar el rango de precisión con el que se desea trabajar. Aquí consideraremos cuatro cifras decimales, siendo el error $\pm 1.10^{-4}$.

2. Localizar los puntos fijos estables deterministas, v_F^* y v_A^*. Para ello se integran numéricamente (3.19) y (3.20) fijando $p_F = 0$ y $p_A = 0$. Para los valores de los parámetros considerados se tiene: $v_F^* = 0.9134...$ y $v_A^* = 0.7366....$

3. Estudiar los correspondientes dominios de atracción, y calcular numéricamente la curva que separa ambos dominios, esto es, la separatriz determinista así como el punto de silla que yace sobre dicha curva, con coordenadas $(v_F^{(s)}, v_A^{(s)}) = (0.2121..., 0.5870...)$.

4. Calcular las variedades inestables asociadas a cada punto fijo estable determinista. Una discusión extensiva y pormenorizada sobre la evaluación de separatrices en sistemas con más de un grado de libertad puede encontrarse en [152].
   Puesto que el sistema es no integrable, y las variedades no se unirán de forma suave, habrá que repetir los siguientes cálculos para cada uno de los dos atractores:

   - Primero se linealizan las ecuaciones dinámicas en torno a los puntos fijos, obteniéndose la siguiente ecuación matricial:

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} \Delta v_F \\ \Delta p_F \\ \Delta v_A \\ \Delta p_A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_1(\underline{v}) & -M_3(\underline{v}) & 0 & 0 \\ 0 & -M_1(\underline{v}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M_2(\underline{v}) & -M_3(\underline{v}) \\ 0 & 0 & 0 & -M_2(\underline{v}) \end{pmatrix}_{\substack{\underline{v}=\underline{v}^* \\ \underline{p}=\underline{0}}} \begin{pmatrix} \Delta v_F \\ \Delta p_F \\ \Delta v_A \\ \Delta p_A \end{pmatrix}$$

$$con \qquad \underline{p} = (p_F, p_A),\ \underline{0} \equiv (0,0), \tag{3.35}$$

donde

$$M_1(v_F, v_A) = \frac{\delta A_F(v_F, v_A)}{\delta v_F} \tag{3.36}$$

$$M_2(v_F, v_A) = \frac{\delta A_A(v_F, v_A)}{\delta v_A} \tag{3.37}$$

$$M_3(v_F, v_A) = \sum_{\mu_F, \mu_A = \pm 1} c_0(\mu_F, \mu_A; v_F, v_A). \tag{3.38}$$

- Los cuatro autovalores asociados a la matriz diagonalizada vienen dados por las funciones $M_1, -M_1, M_2$ y $-M_2$ evaluadas en el punto fijo. Los dos con signo negativo definen autovectores con momento nulo, tangentes por tanto a la variedad estable o determinista [8]. Los dos restantes, tienen asociados los siguientes autovectores:

$$\begin{aligned} \lambda_1 = -M_1 \quad &\longrightarrow \quad \Delta_1 \equiv \left(1, \frac{2M_1}{M_3}, 0, 0\right)\Big|_{\underline{v}^*} \\ \lambda_2 = -M_2 \quad &\longrightarrow \quad \Delta_2 \equiv \left(0, 0, 1, \frac{2M_2}{M_3}\right)\Big|_{\underline{v}^*} \end{aligned} \tag{3.39}$$

sin normalizar.

- Para generar una aproximación local a la separatriz consideramos un abanico de condiciones iniciales. Dichas condiciones iniciales han de ser próximas al punto fijo, pero no coincidir exactamente con él, pues en ese caso serían estacionarias. Así, tomamos un conjunto de vectores, con origen en el punto fijo, y modulo del orden de 10^{-4}, que sean combinaciones lineales de los dos vectores definidos en (3.39), del siguiente modo

$$\Delta(\alpha_i) = \cos(\alpha_i)\Delta_1 + \sin(\alpha_i)\Delta_2, \quad \alpha_i = \frac{i\,\pi}{N}, \quad i = 0, 1, ..., N \tag{3.40}$$

con $N = 50$, por ejemplo [9]. Los puntos del espacio de las fases definidos por:

$$\underline{v}_i = \underline{v}^* + \Delta_i, \quad i = 0, 1, ..., N. \tag{3.41}$$

definen el conjunto de condiciones iniciales.

- Haciendo evolucionar cada uno de los puntos anteriores, siguiendo el flujo dinámico (3.19) y (3.20), se tiene una primera aproximación a la separatriz. Sin embargo, hay trayectorias vecinas que tienden a separarse, dejando zonas "inexploradas" de la variedad inestable.

[8] Nótese que tanto $M_1(\underline{v}^*)$ como $M_2(\underline{v}^*)$ son negativos.

[9] Nótese que, por las simetrías del problema no es necesario considerar condiciones iniciales con $\alpha \in]\pi, 2\pi[$.

- A posteriori, lanzamos nuevas trayectorias con valores de α convenientemente interpolados, de modo que dos trayectorias consecuticas no se separen más de una cierta distancia máxima d prefijada. [10]. De este modo *tenemos un conjunto de curvas en el espacio de las fases, cuya superficie envolvente es la separatriz*, pudíendose refinar la aproximación tanto como se desee.

5. Calcular la integral (3.21) para cada trayectoria en las separatrices de los puntos fijos estables.

6. Para las coordenadas sobre los que exista una proyección no única de la separatriz, se considera sólo aquella rama de la misma que genere un menor valor del potencial. Esto está justificado, pues al tomar el límite $\Omega \to \infty$ en (3.14), sólo el mínimo del potencial dará contribución en cada punto.

7. El próximo paso, una vez que las dos distintas aproximaciones locales del potencial han sido determinadas, es unirlas fijando sus profundidades relativas mediante la determinación de las constantes C_i en (3.21). Esto se hace del siguiente modo:
Existe un algoritmo abstracto, basado en métodos de *cadenas de Markov*, que permite fijar las constantes anteriores en un problema genérico [35]. Aquí, no obstante, aplicaremos el método más práctico introducido por Graham [60].

   El principio general que permite la determinar las constantes, es el balance en el estado estacionario entre los flujos entrante y saliente de cada uno de los dominios de atracción deterministas [58]. En el límite $\Omega \to \infty$, el logaritmo de la probabilidad de escape de cada uno de los mínimos en el estado estacionario viene dado por

$$V_0^{(i)}(v_F^*, v_A^*) - \min_{\underline{v} \in S}\{V_0^{(i)}(v_F, v_A)\} \tag{3.42}$$

   donde S es la frontera del dominio de atracción (esto es, la separatriz determinista) [35].
   En nuestro caso ambos mínimos asociados a cada uno de los atractores se obtienen en el mismo punto, que coincide con el punto de silla determinista. Imponiendo la condición de que los potenciales derivados a partir de cada uno de los mínimos sean iguales en el punto silla, se obtiene $C_2 = C_1 + 0.2934...$, siendo C_1 la constante aditiva para el punto fijo ferromagnético y C_2 la antiferromagnética. La constante que sigue quedando libre es una normalización global.

8. Se toma en cada punto $\underline{v}$ el mínimo:

$$V_0(\underline{v}) = \min\{V_0^{(1)}, V_0^{(2)}\} \tag{3.43}$$

[10] La separatriz puede, también, ser reconstruida de una forma más sistemática, sin necesidad de incluir trayectorias a posteriori [152].

que define finalmente el potencial en cada punto. La forma, que en la práctica utilizamos para calcular este mínimo, consite en discretizar los valores de los dos parámetros de orden, definiendo un retículo cuadrado de 40*40 nudos. Cada punto v_F, v_A, de cada trayectoria se proyecta sobre el nudo del retículo más próximo, y el potencial asociado se archiva si y sólo si es el mínimo sobre dicho punto.

3.3.3 Comentarios sobre el potencial V_0.

En la figura (3.3.3) representamos el potencial estacionario de forma explícita. La primera observación que hacemos es que, tal y como habíamos impuesto el potencial presenta dos mínimos que coinciden con los puntos fijos deterministas estables. En el potencial se refleja dicha estabilidad, pues tiene derivadas segundas positivas en ambos puntos fijos. Al mismo tiempo el mínimo ferromagnético resulta ser mucho más profundo que el antiferromagnético, de acuerdo con (3.42), en el límite $\Omega \to \infty$, será mucho más probable que ocurra una fluctuación que lleve al sistema de $\underline{v}_2$ a $\underline{v}_1$ que a la inversa. De hecho, la diferencia de potencial entre el mínimo ferromagnético y el punto silla es 0.303..., mientras que la barrera de potencial para el estado antiferromagnético es mucho menor, 0.010.... Estas diferencias de potencial condicionan tanto la probabilidad de escape como el tiempo medio de paso de un extremo a otro [70]. Así pues, tal y como habiamos predicho, para estos valores de los parámetros el estado estable antiferromagnético es *metaestable* [11]. En la figura (3.3.3) representamos las curvas de nivel para el potencial. En ella se aprecian dos valles del potencial, cada una correspondiente a uno de los mínimos de la dinámica determinista. Se observa también la presencia de un punto silla que coincide con el punto silla determinista, así como un máximo local en el origen.

La principal característica de V_0 es que, aunque es contínuo, no es diferenciable en todos los puntos. En los puntos de no diferenciabilidad, el mínimo en (3.43) es transferido de una pieza local del potencial a la otra. Este efecto se muestra más claramente en la figura (3.3.3). Se ve como, en un punto intermedio, el mínimo pasa de una de las ramas a la otra y la derivada del potencial en dicho punto es distinta por la derecha y por la izquierda: *el potencial no es diferenciable.*
Por último, en la figura (3.3.3) se muestra que zona del potencial final es reconstruida a partir de cada uno de los extremos. Se observan dos zonas bien diferenciadas, con una frontera sobre la que yacen los puntos de no diferenciabilidad.

3.3.4 Comentarios sobre el método.

En principio, la forma en que hemos construido el potencial no es rigurosa. En efecto, puesto que, como ya habiamos adelantado, el potencial no es diferenciable, el método

[11] Un estudio detallado del decaimiento de estados metaestables en situaciones generales, sin balance detallado, manifiesto puede encontrarse en la referencia [31].

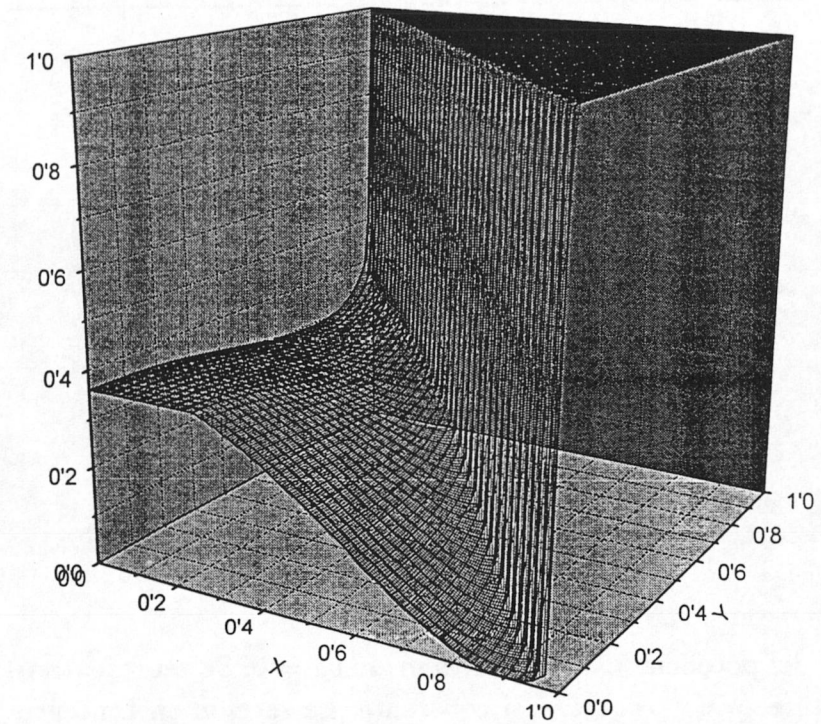


Figura 3.5: Potencial estacionario exacto, solución de la ecuación maestra en el límite de bajo ruido. Se representan sólo valores positivos de los parámetros de orden. Para los valores no físicos, $v_F + v_A > 1$, representamos un potencial constante igual a 1.

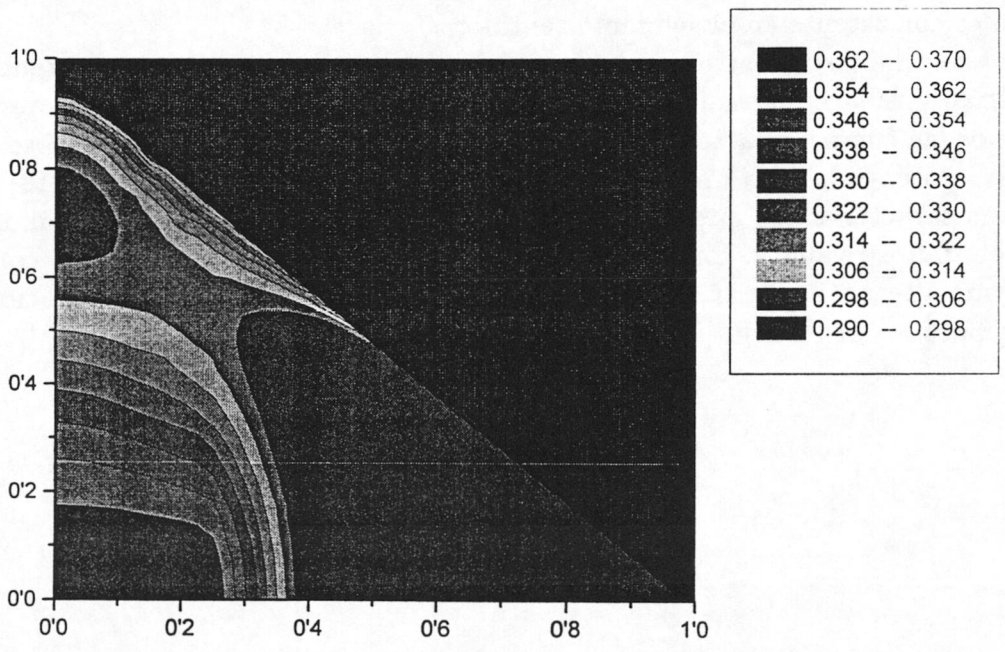


Figura 3.6: Curvas de nivel para el potencial estacionario exacto.

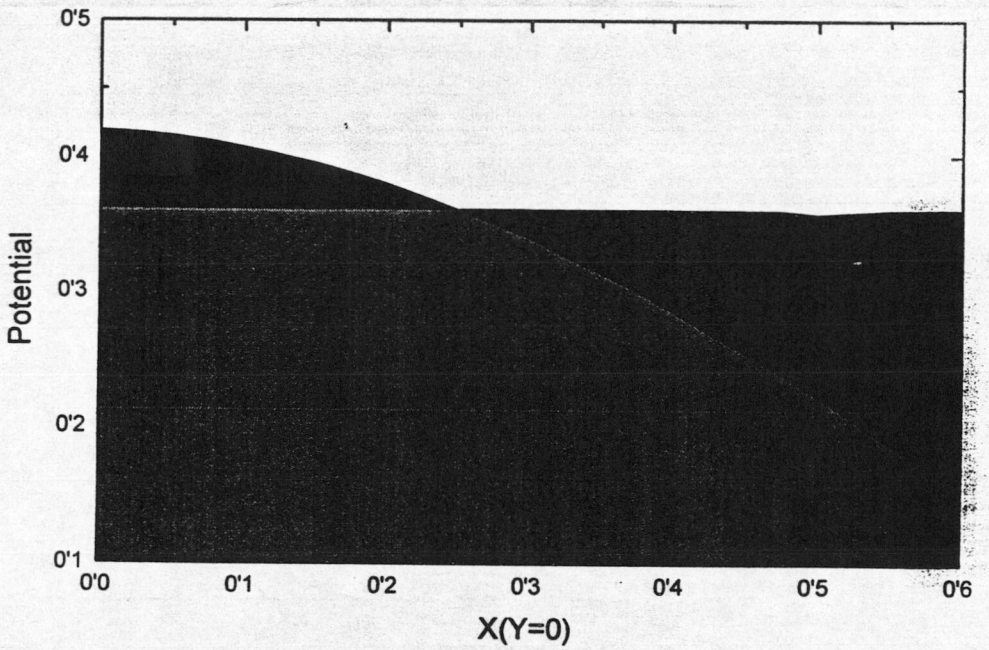


Figura 3.7: Sección del potencial exacto con valor de $v_A = 0$. Se representan $V_0^{(1)}$, curva monótona descendente, y $V_0^{(2)}$, curva casi constante. La sección en tono gris más claro representa el mínimo de los dos valores anteriores, y define al potencial V_0.

de las curvas carcterísticas no puede aplicarse en todos los puntos, hecho que en la construcción anterior no se ha tenido en cuenta. Sin embargo, hemos probado que nuestro método es consistente en el siguiente sentido:
Una vez que hemos construido el potencial, aislamos la zona de no diferenciabilidad del mismo, y rehacemos todos los cálculos, con la única diferencia de que ahora interrumpimos las curvas características al llegar a dicha zona. Procediendo así se recupera el mismo potencial. Esto implica, que en ningún punto, el mínimo en (3.43) proviene de curvas caractéristicas que hayan atravesado una zona de no diferenciabilidad y, por tanto, perdido su validez. En resumen: la forma en que hemos trabajado es consistente. Una forma alternativa de trabajar basada en la utilización de técnicas variacionales, ha sido propuesta por Jauslin [85].

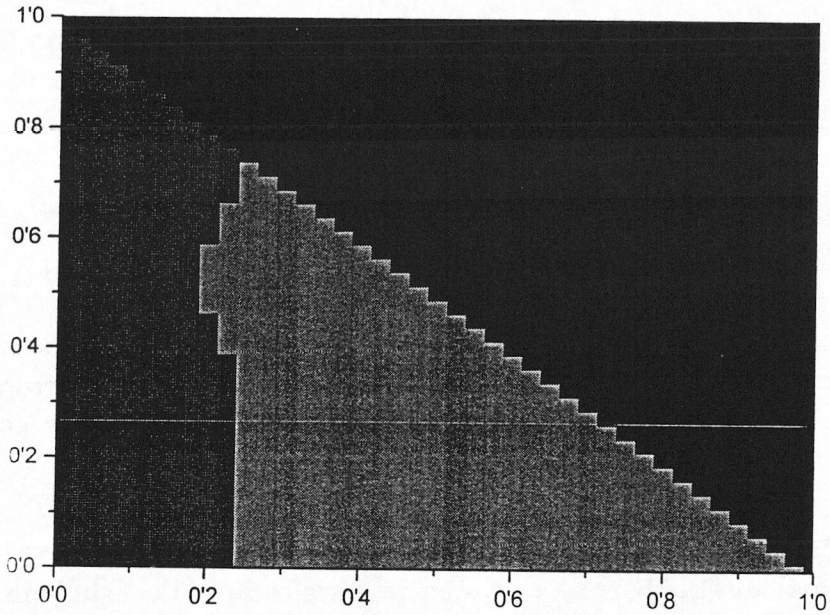


Figura 3.8: En tono oscuro (claro) se marcan los valores de los parámetros de orden para los que el potencial estacionario se obtiene a partir de trayectorias que parten del estado antiferromagnético (ferromagnético).

3.4 Modelados mediante ecuaciones de Fokker-Planck y sus soluciones estacionarias.

Como dijimos al comienzo del capítulo, vamos a construir diferentes representaciones mediante ecuaciones de tipo Fokker-Planck de nuestro modelo y calcular sus correspondientes potenciales estacionarios.
Introduciremos las distintas ecuaciones de Fokker-Planck en orden de complejidad creciente. Para cada una de ellas el proceso de construcción del potencial estacionario asociado sigue los mismos pasos que hemos detallado en la sección anterior, por lo que aquí no entraremos a discutirlo, y mostraremos directamente los resultados.

3.4.1 Fokker-Planck con ruido con coeficiente de difusión constante.

Consideremos la siguiente ecuación de Fokker-Planck :

$$\frac{\partial Q_t(\underline{v})}{\partial t} = -\sum_{Y=F,A} \frac{\partial}{v_Y} \left[A_Y(\underline{v}) Q_t(\underline{v}) - \frac{1}{\Omega} \sum_{Z=F,A} \frac{\partial}{v_Z} Q_t(\underline{v}) \right] \tag{3.44}$$

que se obtiene considerando un primer sumando que reproduzca la dinámica determinista y añadiendo un segundo sumando con derivadas segundas, en la forma más sencilla

posible, esto es, constante. [12] Sustituyendo (3.14) en (3.44), y resolviendo la ecuación de Hamilton Jacobi asociada, se obtiene el potencial que representamos en la figuras (3.4.1) y (3.4.1) Los principales resultados son:

- La forma cualitativa del potencial es la correcta, con extremales en los extremales deterministas.

- Aunque al igual que el potencial exacto, es también no diferenciable, la zona donde el mínimo cambia de rama es mucho más próxima al mínimo antiferromagnético. En particular, la linea de no diferenciabilidad corta al eje $v_F = 0$, y no a $v_A = 0$ como en el potencial exacto.

- Cualitativamente muestra grandes desviaciones sitemáticas respecto al potencial exacto. En particular, la barrera de potencial para escapar del estado metaestable se sobreestima en más de un 40 por ciento respecto al valor exacto, y la diferencia de potencial entre el punto silla y el estado ferromagnético, en más de un 50 por ciento.

- Es obvio que propiedades dependientes de la forma global del potencial no son correctamente reproducidas en esta aproximación.

3.4.2 Fokker-Planck del desarrollo en Ω de van Kampen.

Una forma usual de construir una ecuacion de Fokker-Planck a partir de una ecuación maestra dada consiste en hacer el desarrollo en Ω introducido originalmente por van Kampen [89], y que se basa en considerar las fluctuaciones proporcionales a $\Omega^{1/2}$ y desarrollar posteriormente en potencias de Ω la ecuación maestra.

En este método se establece una separación de escalas. En el primer orden se obtiene la evolución determinista. En el segundo se obtiene una ecuación de Fokker-Planck . Esta describe las fluctuaciones en torno a los estados estacionario deterministas. Por la propia forma en que se construye, la ecuación de Fokker-Planck es de naturaleza local, y no intenta, en absoluto, reproducir características globales de la dinámica microscópica. De hecho, se tiene una ecuación diferente para cada punto fijo estable determinista y no una que caracterice la dinámica completa. Por este motivo, a pesar de ser uno de los métodos más comúnmente utilizados en la bibliografía, no lo consideraremos aquí.

[12] Esta ecuación es equivalente a considerar una ecuación de Langevin, que describa la evolución determinista con ruido gaussiano constante. Vease el capítulo siguiente.

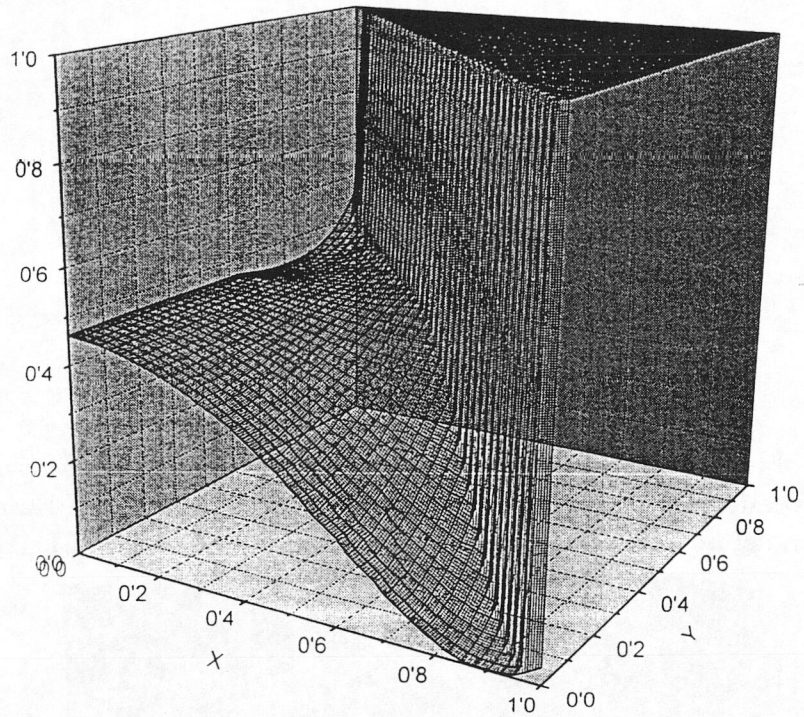


Figura 3.9: Potencial estacionario asociado a la ecuación de Fokker-Planck con coeficiente de difusión constante.

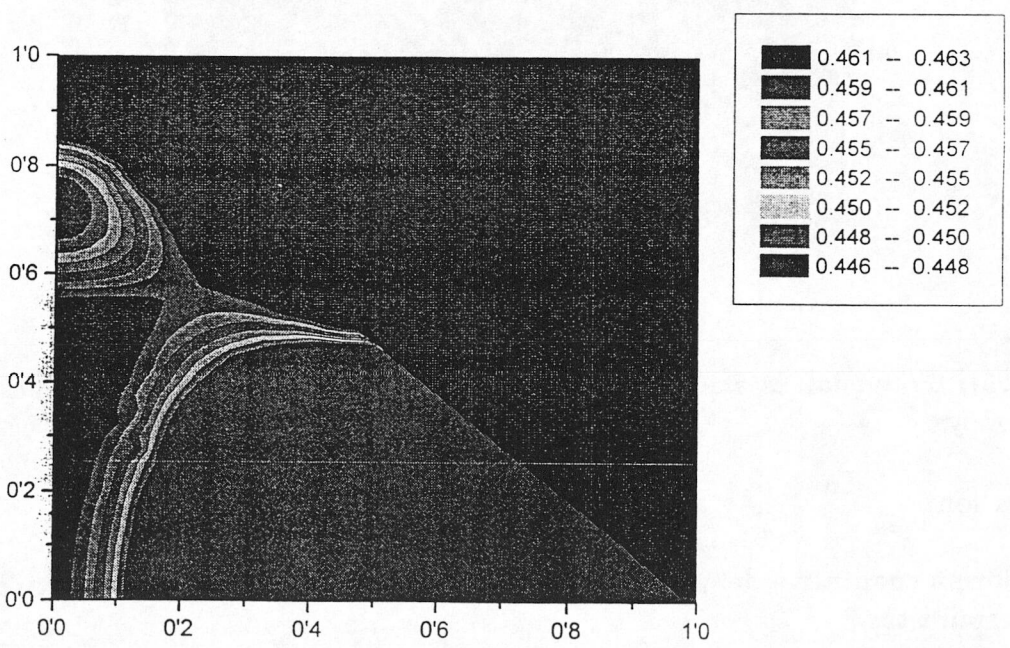


Figura 3.10: Curvas de nivel para el potencial estacionario asociado a la ecuación de Fokker-Planck con coeficiente de difusión constante.

3.4.3 Fokker-Planck de Kramers-Moyal.

Consideremos la siguiente ecuación de Fokker-Planck

$$\frac{\partial Q_t(\underline{v})}{\partial t} = -\sum_{Y=F,A} \frac{\partial}{v_Y}\left[A_Y(\underline{v})Q_t(\underline{v}) - \frac{1}{2\Omega}\sum_{Z=F,A}\frac{\partial}{v_Z}B_{YZ}(\underline{v})Q_t(\underline{v})\right] \tag{3.45}$$

donde

$$B_{YZ}(\underline{v}) = \sum_{\mu_F,\mu_A=\pm 1} c_0(\mu_F,\mu_A;v_F,v_A)\mu_Y\mu_Z \tag{3.46}$$

Esta ecuación se obtiene truncando el desarrollo exacto de Kramers-Moyal en segundo orden [13]. Sustituyendo (3.14) en (3.45), y resolviendo la ecuación de Hamilton Jacobi asociada, se obtiene el potencial que representamos en la figuras (3.4.3). Los principales

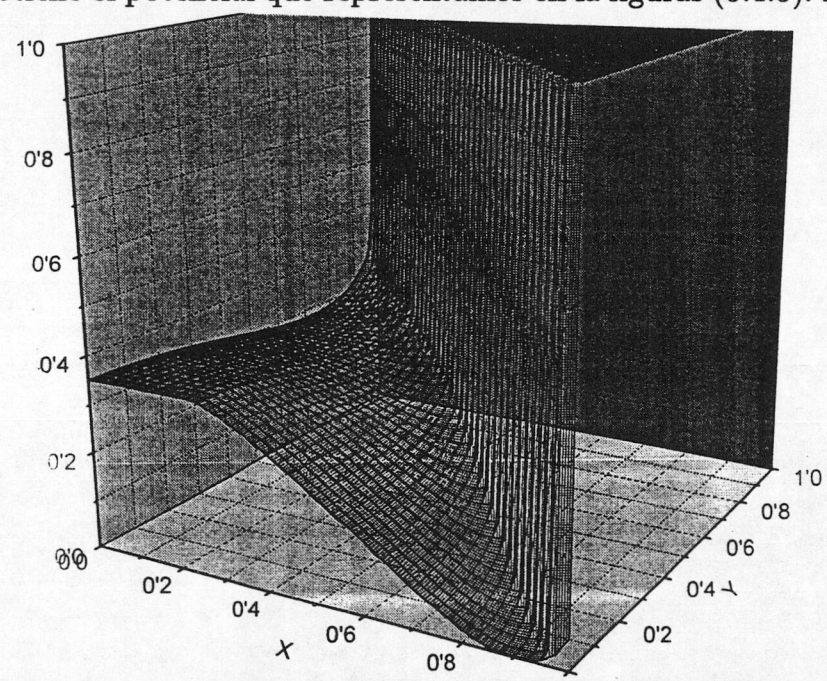


Figura 3.11: Potencial estacionario asociado a la ecuación de Fokker-Planck , de Kramers-moyal.

resultados son:

- La forma cualitativa del potencial es la correcta, con extremales en los extremales deterministas.
- La zona de no diferenciabilidad se reproduce ahora mucho mejor cualitativamente que en la aproximación anterior.

[13] Véase [89, 148, 94, 127], así como el capítulo 2.

- Siguen habiendo desviaciones sistemáticas respecto al potencial exacto. Estas se incrementan al alejarse del mínimo más profundo, siendo mayores del 5 por ciento del valor del potencial de la ecuación maestra en algunos puntos. En particular, la barrera de escape del estado metaestable es ahora menor que en el exacto, lo que significa que esta aproximación sobreestima en más de un 5 por ciento la probabilidad de escape del estado antiferromagnético.
- Las propiedades dependientes de la forma global del potencial no son correctamente reproducidas en esta aproximación.

3.4.4 Fokker-Planck introducida en el capítulo 2.

Para aplicar el método introducido en el capítulo anterior, es conveniente expresar primero la ecuación maestra (3.6) en términos de las magnetizaciones de cada una de las dos subredes que definen el modelo, dadas por $v_1 = (v_F + v_A)/2$ y $v_2 = (v_F - v_A)/2$, en lugar de los parámetros de orden ferromagnético y antiferromagnético [14]. El desarrollo de Kramers-Moyal de la ecuación maestra conduce a:

$$\sum_{i=1,2} \left[\sum_{\mu_i = \pm 1} w_0(\mu_1, \mu_2; v_1, v_2) \left(\exp\left(-\mu_i \frac{\partial V_0(v_1, v_2)}{\partial v_i} \right) - 1 \right) \right] \tag{3.47}$$

donde μ_i representa los incrementos en la variable v_i, y w_o es c_0 tras cambiar de variables. A partir de (3.47) siguiendo el método del capítulo 2 y deshaciendo el cambio de variables anterior se obtiene

$$\frac{\partial Q_t(\underline{v})}{\partial t} = - \sum_{Y=F,A} \frac{\partial}{v_Y} \left[A_Y(\underline{v}) Q_t(\underline{v}) - \frac{1}{\Omega} \sum_{Z=F,A} L_{YZ}(\underline{v}) \frac{\partial}{v_Z} Q_t(\underline{v}) \right] \tag{3.48}$$

con

$$L_{YZ}(\underline{v}) = \frac{c_0(-1, \mu_A; v_F, v_A) - c_0(1, \mu_A; v_F, v_A)}{\log \left[\frac{c_0(-1, \mu_A; v_F, v_A)}{c_0(1, \mu_A; v_F, v_A)} \right]} \pm \frac{c_0(\mu_F, -1; v_F, v_A) - c_0(\mu_F, 1; v_F, v_A)}{\log \left[\frac{c_0(\mu_F, -1; v_F, v_A)}{c_0(\mu_F, 1; v_F, v_A)} \right]} \tag{3.49}$$

donde el signo más (menos) corresponde a $Y = Z$ ($Y \neq Z$). Sustituyendo (3.14) en (3.48), y resolviendo la ecuación de Hamilton Jacobi asociada, se obtiene el potencial que representamos en la figuras (3.4.4). Los principales resultados son:

- Dentro del grado de precisión con el que estamos trabajando (4 cifras decimales), *la diferencia entre este potencial y el exacto, es compatible con cero para todos los valores de* (v_F, v_A).
- Este potencial no es exacto, pero aproxima al exacto con enorme precisión, mucho mejor, en cualquier caso que las aproximaciones consideradas anteriormente, y no sólo en las vecindades de los extremales.

[14] De este modo se tienen explícitamente desacoplados los saltos en las dos variables que caracterizan al modelo. Véase capítulo 2.

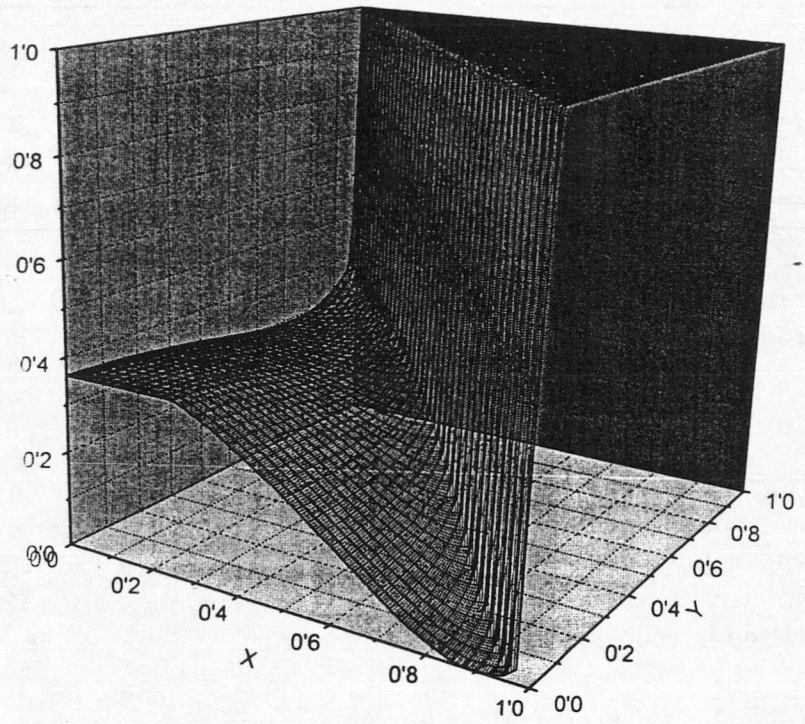


Figura 3.12: Potencial estacionario asociado a la ecuación de Fokker-Planck introducida en el segundo capítulo.

3.5 Conclusión.

La ecuación de Fokker-Planck introducida en el capítulo anterior reproduce con gran precisión el potencial estacionario asociado a la ecuación maestra que define un modelo con competición de dinámicas ferromagnética y antiferromagnética. Por lo tanto, nuestra ecuación de Fokker-Planck , al menos en este caso particular, no sólo reproduce de forma exacta las propiedades locales del potencial estacionario en un entorno de los extremos, sino que también da una aproximación excelente a propiedades dependientes de la forma global del potencial. Este resultado no prueba la validez general del método, que, quizá, en otro tipo de situaciones de no equilibrio puede fallar. Sin embargo, reafirma fuertemente la confianza en el mismo para sistemas de no equilibrio con dinámicas compitiendo, y confirma que este nuevo modelado es un paso hacia adelante en la tarea de representar mediante ecuaciones contínuas modelos definidos microscópicamente.

Capítulo 4

Ecuaciones estocásticas y funcionales generadores.

En apartados precedentes hemos construido ecuaciones de tipo Fokker-Planck para caracterizar ciertos sistemas de no-equilibrio. A partir de una ecuación de Fokker-Planck es siempre posible construir un funcional generador para las correlaciones que de ella se derivan, y asociado al funcional generador un lagrangiano. El funcional generador al completo, es el punto de partida para extraer información física del sistema en cuestión. En particular, a partir de él se puede extraer de forma sistemática cualquier correlación del sistema, se pueden aplicar técnicas perturbativas, aproximaciones de campo medio, o aproximaciones de punto de silla.

Existe gran confusión en la literatura sobre cual es la forma del funcional generador asociado a una cierta ecuación de Fokker-Planck dada. Se pueden hacer construcciones con distintos órdenes de rigor y complejidad [128], y no hay unanimidad respecto al resultado final, ni a las posibles interpretaciones del lagrangiano [1]. Aunque existen en la bibliografía deducciones directas de lagrangianos asociados a ecuaciones de Fokker-Planck [2], nosotros preferimos aquí seguir un proceso de razonamiento un poco más elaborado, mediante el cual evitamos el uso de un formalismo operatorial [97] y que, por otra parte, nos permite estudiar también ecuaciones de tipo Langevin, que se usan frecuentemente en el estudio de fenómenos estadísticos en general y de procesos de no-equilibrio en particular [74].

Esquematizado, el proceso que seguimos es el siguiente:

- En primer lugar demostramos la equivalencia estocástica entre ecuaciones de tipo Fokker-Planck y Langevin.

[1] Véase, por ejemplo, [55, 25, 128, 176]. Otras referencias, de caractes más matemático sobre integrales de camino son, [48, 92, 171, 35].

[2] Véase, por ejemplo, la solución de Valsakumar haciendo uso de la fórmula de Trotter, [163], o los trabajos de Langouche et al, [97].

- Observamos la importancia de la forma de discretizar el tiempo en la equivalencia anterior.
- Construimos el funcional generador a partir de la ecuación de Langevin. El lagrangiano asociado no es único sino dependiente del tipo de discretización considerado.
- Finalmente verificamos la covarianza de las ecuaciones anteriores así como la del funcional generador ante transformaciones puntuales de variable. A lo largo de todo este capítulo, vamos a considerar, para no complicar demasiado la notación, ecuaciones de Fokker-Planck con un sólo grado de libertad. La extensión a sistemas con más variables es directa, y no presenta ninguna dificultad adicional.

4.1 Equivalencia de las ecuaciones de Langevin y Fokker-Planck .

Es un hecho conocido que las ecuaciones estócasticas de tipo Langevin y Fokker-Planck son equivalentes y que un mismo proceso puede ser descrito en términos de una u otra indistintamente. Sin embargo, esta equivalencia no está unívocamente definida sino que existe cierta ambigüedad dependiendo de que tipo de convención se considere [3]. En este apartado vamos a establecer la conexión entre ambos tipos de ecuaciones aclarando el origen de la ambigüedad anterior.

Consideremos un cierto proceso estocástico caracterizado por una variable cuya evolución temporal viene descrita por la siguiente ecuación de Langevin,

$$\dot{q}(t) = f(q(t)) + h(q(t))\xi(t) + g(q(t))\xi^2(t) \tag{4.1}$$

donde $\xi(t)$ es un ruido blanco gaussiano definido por sus cumulantes [4]:

$$\begin{aligned} << \xi(t) >> &= 0 \\ << \xi(t_1)\xi(t_2) >> &= \delta(t_1 - t_2) \\ << \xi(t_1)\xi(t_2)...\xi(t_n) >> &= 0, \ \forall n \geq 3 \end{aligned} \tag{4.2}$$

Es importante notar que el término lineal en el ruido se encuentra acoplado a una cierta función $h(q(t))$ dependiente de $q(t)$, es decir, que la intensidad de la fuente estocástica está acoplada a la propia variable. En el caso particular en que $h(q) = h = cte$ diremos que se tiene un *ruido constante*. El último sumando cuadrático en la función ruido ha sido incluido por completitud. En muchos casos

[3] A este problema, se le denomina, en la literatura, dilema de Ito-Stratonovich [89, 80, 158]

[4] Es posible también considerar ecuaciones de Langevin con ruido correlacionado (no blanco), y estudiar su relación con ecuaciones de Fokker-Planck y funcionales generadores [121].

las ecuaciones de Langevin estudiadas en la bibliografía no consideran términos de este tipo. A partir de (4.1) es posible derivar una nueva ecuación que describa no la evolución estocástica de la variable q, sino la evolución de la función de probabilidad asociada: $P(q,t)$. Esta función representa la probabilidad de tener un valor de la variable q en un instante de tiempo t. Es decir, es posible escribir una nueva ecuación que describa el proceso estocástico no en función de una cierta función aleatoria sino en términos de "nubes" de probabilidad. Para ello es necesario discretizar en el tiempo la ecuación de Langevin (4.1).[5] Esto es, consideremos en lugar de una variable temporal contínua, una sucesión discreta de valores de t, que llamaremos t_i, separados por incrementos temporales finitos $\Delta(t) = \varepsilon$ de modo que $t_n = t_0 + n\varepsilon$ con $N \geq n \geq 0$, siendo t_0 y t_N los tiempos inicial y final respectivamente.

La forma de expresar la ecuación de Langevin en estos términos no es única, pudiéndose obtener distintas versiones discretas de una misma ecuación de partida cumpliendo todas ellas la condición de tender a la ecuación original cuando $\varepsilon \to 0$ con $N\varepsilon = constante$. Para caracterizar un conjunto de posibles discretizaciones posibles introducimos un parámetro α, con $1 \geq \alpha \geq 0$. Así (4.1) queda:

$$\frac{q_{n+1} - q_n}{\varepsilon} = f(\alpha q_n + (1-\alpha)q_{n+1}) + h(\alpha q_n + (1-\alpha)q_{n+1})\xi_n + g(\alpha q_n + (1-\alpha)q_{n+1})\xi_n{}^2 \tag{4.3}$$

donde $q_n = q(t_n)$ y $\xi_n = \xi(t_n)$.
Simplificando notación definimos:

$$\tilde{q}_n = \alpha q_n + (1-\alpha)q_{n+1} \tag{4.4}$$

y $\zeta_n = \varepsilon\,\xi_n$, con lo que (4.3) queda

$$q_{n+1} = q_n + \varepsilon f(\tilde{q}_n) + h(\tilde{q}_n)\zeta_n + g(\tilde{q}_n)\zeta_n{}^2 \tag{4.5}$$

La distribución para el ruido blanco gaussiano es

$$P(\zeta_0, \zeta_1, ..., \zeta_{N-1}) = \frac{1}{(2\pi\varepsilon)^{\frac{N}{2}}} \exp\left(-\frac{1}{2\varepsilon}\sum_{i=0}^{N-1}\zeta_n{}^2\right). \tag{4.6}$$

Al ser una distribución gaussiana los cumulantes asociados son todos nulos excepto $<< \zeta_i\zeta_j >>= \varepsilon\delta_{i,j}$, siendo δ la delta de Kronecker [6]. De este modo ζ_n es de orden $\varepsilon^{1/2}$ y ξ_n de orden $\varepsilon^{-1/2}$.

Definimos

$$P_{n+1}(q_{n+1}) =< \int dq_n P_n(q_n)\delta(S_n) >_{\zeta_n} \tag{4.7}$$

[5]Existen deducciones en las que se trabaja directamente en el contínuo, pero a nuestro parecer no son lo suficientemente claras y llevan siempre a ambigüedades que quedan mejor resueltas trabajando con ecuaciones discretizadas.

[6]Es directo comprobar que en el límite $\varepsilon \to 0$ estos cumulantes reproducen (4.2) .

donde $S_n = q_{n+1} - q_n + \varepsilon f(\tilde{q}_n) + h(\tilde{q}_n)\zeta_n + g(\tilde{q}_n){\zeta_n}^2$ y $< F >_{\zeta_n}$ simboliza el promedio de F sobre ζ_n. Esta ecuación expresa la probabilidad de tener un cierto valor de la variable q en un instante de tiempo t_{n+1} en función de la distribución de probabilidad en el instante anterior t_n. Para ello hace uso de la ecuación de evolución estocástica (4.5) y promedia sobre todos los valores posibles del ruido. Desarrollando la delta en series de Taylor se tiene

$$P_{n+1}(q_{n+1}) = \left\langle \int dq_n P_n(q_n) \left[\delta(q_{n+1} - q_n) - \frac{\partial \delta(q_{n+1} - q_n)}{\partial q_n} \left(\varepsilon f(\tilde{q}_n) + h(\tilde{q}_n)\zeta_n + g(\tilde{q}_n){\zeta_n}^2 \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \delta(q_{n+1} - q_n)}{\partial^2 q_n} h(\tilde{q}_n)^2 {\zeta_n}^2 \right] \right\rangle_{\zeta_n} + \Theta(\varepsilon^{(3/2)}). \tag{4.8}$$

Como $\frac{\partial q_{n+1}}{\partial q_n} \neq 0$ conviene desarrollar las funciones f y h en torno a q_n. Hecho ésto, e integrando por partes queda

$$P_{n+1}(q_{n+1}) - P_n(q_{n+1}) = \left\langle \left[-\varepsilon \frac{\partial f(q_n) P_n(q_n)}{\partial q_n} - \frac{\partial (h(q_n)\zeta_n + g(q_n){\zeta_n}^2) P_n(q_n)}{\partial q_n} - (1-\alpha) \frac{\partial h(q_n) \frac{\partial h(q_n)}{\partial q_n} {\zeta_n}^2 P_n(q_n)}{\partial q_n} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 h^2(q_n) {\zeta_n}^2 P_n(q_n)}{\partial {q_n}^2} \right]_{q_n = q_{n+1}} \right\rangle_{z_n} + \Theta(\varepsilon^{3/2}). \tag{4.9}$$

Haciendo los promedios respecto al ruido y tomando el límite $\varepsilon \to 0$ queda finalmente

$$\frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial q} \left[(f(q) + g(q)) + \frac{(1-\alpha)}{2} \frac{\partial h^2(q)}{\partial q} P(q,t) \right] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial q^2} \left[h^2(q) P(q,t) \right] \tag{4.10}$$

que es la ecuación de Fokker-Planck dependiente del parámetro de discretización. En particular, tomando $\alpha = 1$ se tiene la ecuación de Ito [80] mientras que $\alpha = 1/2$ es la elección de Stratonovich [158]. Nótese que el efecto del término cuadrático en el ruido es introducir una fuerza adicional que se suma a $f(q(t))$.

En resumen, de una ecuación de Langevin se puede derivar una Fokker-Planck que dicta la evolución de la función de probabilidad asociada. Esta derivación no es unívoca sino que depende de cual sea la forma de discretización considerada.

En el proceso inverso, es decir, el paso de una ecuación de tipo Fokker-Planck a una Langevin existe una ambigüedad adicional. Esta es que la función fuerza que aparece en el primer sumando puede asociarse a dos tipos de sumandos diferentes

en una ecuación de Langevin: bien un término independiente del ruido ruido, bien un término cuadrático en el ruido. Después veremos que esta libertad es completamente irrelevante en la construcción del funcional generador asociado.

4.2 Integrales de camino asociada a una ecuación de Langevin.

Siguiendo la filosofía originalmente introducida por Wiener [167] y Feynman [33] en diferentes contextos, es posible representar todo proceso estocástico mediante una integral de camino. Dicha integral expresa la probabilidad de alcanzar un cierto estado $q_f(t)$ en un tiempo t en función de cual sea la distribución de probabilidad, $P(q,t_0)$, en un instante de tiempo anterior. Para ello, se "suman" las probabilidades de todos los caminos aleatorios posibles, que conectan cada estado inicial con el estado final, adecuadamente pesados. La representación de un proceso estocástico en términos de integrales de camino tiene importancia tanto práctica como teórica. Práctica, puesto que permite obtener un lagrangiano efectivo que describe la física del sistema de forma muy compacta, y a partir del cual se puede derivar, de forma sistemática, todas las posibles correlaciones del sistema. Teórica, puesto que permite establecer un paralelismo entre la formulación de la teoría de los procesos estocásticos y la teoría de campos. Así, para sistemas definidos sobre un contínuo de grados de libertad, el lagrangiano asociado será un lagrangiano de campos, completamente análogo a los que aparecen en Teoría Cuántica de Campos (T.C.C). De hecho la analogía entre ambos formalismos se deriva de una analogía teóica más profunda, en el sentido de que tanto los sistemas estocásticos como los campos cuánticos son sistemas fluctuantes, si bien las fluctuaciones en uno y otro caso tienen distinto origen: cuántico en uno y estadístico en el otro. En cualquier caso, conocido el lagrangiano, es posible aplicar toda la maquinaria desarrollada en el marco de la T.C.C..
Nuestro objetivo en este apartado es obtener la representación en términos de integrales de camino de la ecuacion de Langevin (4.1), y derivar de ella el lagrangiano asociado. Para ello construimos un funcional generador de la forma genérica siguiente:

$$Z[J(t)] = \int Dq(t) \exp\left(-\int dt \mathcal{L}(q(t), \dot{q}(t), J(t))\right) \tag{4.11}$$

donde $Dq(t)$ es una medida de integración, de modo que

$$\left.\frac{\delta Z[J]}{\delta J(t_1)J(t_2)...J(t_n)}\right|_{J=0} =< q(t_1)q(t_2)...q(t_n) > \tag{4.12}$$

UNIVERSIDAD DE GRANADA
1 8 MAR. 1994
COMISION DE DOCTORADO

donde $J = \{J_i\ ,\ i = 0, ..., N-1\}$. Considerando (4.5) y la notación allí utilizada, definimos como funcional generador

$$Z[J] = \int dq_0 P(q_0, t_0) \int\int ... \int \prod_{i=0}^{N-1} d\zeta_i \frac{1}{(2\pi\varepsilon)^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2\varepsilon}\zeta_i{}^2 + \varepsilon q_i J_i\right] \qquad (4.13)$$

donde $J_i = J(t_i)$.
Justificación:

- Las integrales en la definición de $Z[J]$ implican una "suma" sobre todos los caminos posibles (discretizados en el tiempo) partiendo de puntos iniciales distribuidos según $P(q_0, t_0)$.
- El factor

$$\prod_{i=0}^{N-1} \frac{1}{(2\pi\varepsilon)^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2\varepsilon}\zeta_i{}^2\right] \qquad (4.14)$$

  da la probabilidad de que cada uno de los caminos anteriores (sucesión de valores de ζ_i) ocurra, de acuerdo con (4.6).
- Por último, el factor $\prod_{i=0}^{N-1} \exp(\varepsilon q_i J_i)$ hace que al derivar el funcional generador respecto a J_k a parezca un factor adicional, q_k, en la integral y, por tanto, evaluando dicha derivada en $J_i = 0$, $i = 0, ..., N-1$ se tenga la probabilidad de "pasar" por q_k multiplicada por q_k, esto es, el promedio de q_k. Del mismo modo se obtienen correlaciones de órdenes superiores, por lo que en el límite de tiempos continuos se reproduce la propiedad (4.12).
- La medida asociada es definida positiva, lo que permite la interpretación de la integral en términos probabilísticos.

4.2.1 Ecuación de Langevin sin término cuadrático en el ruido.

Para no complicar en exceso las ecuaciones vamos a desarrollar explícitamente el funcional generador para el caso en que la función $g(q(t))$ en (4.3) sea nula. A posteriori veremos como afecta la inclusión de un término cuadrático.

Utilizando (4.3) para hacer un cambio de variables independientes de $\{\zeta_i,\ i = 0, ..., N-1\}$ a $\{q_j,\ j = 1, ..., N\}$ queda

$$Z[J] = \int dq_0 P(q_0, t_0) \int\int ... \int \prod_{j=1}^{N} dq_j \frac{1}{(2\pi\varepsilon)^{1/2}} \prod_{j=0}^{N-1} \mathcal{J}(q_0, q_1, ..., q_N)$$
$$\exp\left[-\frac{1}{2\varepsilon}\left(\left[q_{j+1} - q_j - \varepsilon f(\tilde{q}_i)\right]^2 \frac{1}{h(\tilde{q}_i)^2} - 2\varepsilon^2 q_j J_j\right)\right] \exp(\varepsilon q_i J_i) \qquad (4.15)$$

donde $\mathcal{J}(q_0, q_1, ..., q_N)$ es el jacobiano de la transformación, esto es, $\mathcal{J} \equiv \|detM\|$ con

$$M_{i,j} = \frac{\partial \zeta_i}{\partial q_j} = \left[\delta_{i+1,j} - \delta_{i,j} - \varepsilon \frac{\partial f(\tilde{q}_i)}{\partial q_j}(\delta_{i,j} + \delta_{i+1,j})\right] h(\tilde{q}_i)^{-1} - \left[\frac{\partial h(\tilde{q}_i)}{\partial q_j}(\delta_{i,j} + \delta_{i+1,j})\right] h(\tilde{q}_i)^{-2}. \tag{4.16}$$

Los elementos de la diagonal corresponden a $j = i + 1$, por lo que utilizando la propiedad $\det(A) = \exp(Tr(\log(A)))$ y la notación $\Delta_j \equiv q_{j+1} - q_j$ se tiene

$$\mathcal{J} = \exp \sum_{j=0}^{N-1} \Big(\log \Big[1 - \varepsilon(1-\alpha) \Big(f'(\tilde{q}_j) + h'(\tilde{q}_j) h^{-1}(\tilde{q}_j)[\Delta_j - \varepsilon f(\tilde{q}_j)] \Big) \Big] - \log(h(\tilde{q}_j)) \Big) \tag{4.17}$$

donde las primas indican derivación respecto a las variables $\tilde{q}_j$. Desarrollando el primer logaritmo en series de Taylor queda

$$\mathcal{J} = \prod_{j=0}^{N-1} h(\tilde{q}_j)^{-1} \exp \sum_{j=0}^{N-1} \Big[-\varepsilon(1-\alpha) \Big(f'(\tilde{q}_j) - h'(\tilde{q}_j) h^{-1}(\tilde{q}_j)[\Delta_j - \varepsilon f(\tilde{q}_j)] \Big) - \tfrac{1}{2}(1-\alpha)^2 h'(\tilde{q}_j)^2 h(\tilde{q}_j)^2 {\Delta_j}^2 + \Theta(\varepsilon^{3/2}) \Big]. \tag{4.18}$$

Con esto ya tenemos una expresión para la integral de camino. Sin embargo, aparecen términos proporcionales a ${\Delta_j}^2$ para los que no sabemos hacer el límite al contínuo directamente. Es preferible expresar estos términos en función de algún tipo de potencial efectivo de la forma $V(\tilde{q}_j)$ dependiente de las variables $\tilde{q}_j$ y no de los incrementos, cuyo límite al contínuo es conocido. Es, por tanto, necesario hacer una última transformación. Para ello utilizamos una de las propiedades demostradas en el apéndice B, según la cual en una integral de caminos de tipo cuadrático se tiene la siguiente equivalencia [7]

$${\Delta_j}^2 \doteq \varepsilon h(\tilde{q}_j)^2. \tag{4.19}$$

Con esto,

$$Z[J] = \int dq_0 P(q_0, t_0) \int ... \int \prod_{j=1}^{N} dq_j \frac{1}{(2\pi\varepsilon)^{1/2}} \prod_{j=0}^{N-1} \frac{1}{h(\tilde{q}_j)} \exp \Big[\frac{-1}{2\varepsilon} \Big([\Delta_j - \varepsilon f(\tilde{q}_i)]^2 \frac{1}{h(\tilde{q}_i)^2} \Big) - \varepsilon(1-\alpha) \Big(f'(\tilde{q}_j) + \frac{h'(\tilde{q}_j)}{h(\tilde{q}_j)} [\Delta_j - \varepsilon f(\tilde{q}_j)] \Big) - \frac{1}{2}\varepsilon(1-\alpha)^2 h'(\tilde{q}_j)^2 + \varepsilon q_j J_j \Big] \tag{4.20}$$

[7] El símbolo $\doteq$, introducido por DeWitt en [171], simboliza equivalencia en integrales de camino.

y tomando los límites $\varepsilon \to 0$ y $N \to \infty$ manteniendo constante el producto εN se tiene

$$Z[J] = \int \mathcal{D}q(t) \exp\Big[-\frac{1}{2}\int dt\Big(\Big[\dot{q}(t) - f(q(t))\Big]^2 \frac{1}{h(\tilde{q}_i)^2} + 2(1-\alpha)f'(q(t)) + 2(1-\alpha)\frac{h'(q(t))}{h(q(t))}\Big[\dot{q}(t) - f(q(t))\Big] + (1-\alpha)^2 h'(q(t))^2 - 2q(t)J(t)\Big)\Big] \tag{4.21}$$

o lo que es lo mismo

$$Z[J] = \int \mathcal{D}q(t) \exp\Big[-\frac{1}{2}\int dt\Big(\Big[\dot{q}(t) - f(q(t)) + (1-\alpha)h(q(t))h'(q(t))\Big]^2 \frac{1}{h(q(t))^2} + 2(1-\alpha)f'(q(t)) - 2q(t)J(t)\Big)\Big] \tag{4.22}$$

donde se ha definido la medida de integración como,

$$\mathcal{D}q(t) = \lim_{\varepsilon \to 0,\, N \to \infty} \left[\prod_{j=1}^{N}\left(dq_j \frac{1}{(2\pi\varepsilon)^{1/2}}\right)\prod_{j=0}^{N-1}\left(\frac{1}{h(\tilde{q}_j)}P(q_0,t_0)\right)\right]. \tag{4.23}$$

En el caso más usual de que se desee estudiar correlaciones estacionarias a partir del anterior funcional generador es preciso tomar el límite $t_0 \to -\infty$. De este modo, transcurrido un intervalo infinito de tiempo cualquier dependencia en el estado inicial se pierde, y el factor $P(q_0, t_0)$ puede eliminarse de la medida en (4.23). De la expresión final para el funcional generador se obtiene directamente el lagrangiano asociado a la ecuación de Langevin de partida, por comparación directa de (4.21) con (4.11).
Queremos recalcar el hecho de que este lagrangiano es dependiente del esquema de discretización, y que la su relación con las ecuaciones estocásticas de Fokker-Planck o Langevin queda fijada únicamente después de fijar una prescripción.[8] Fijada ésta todas las relaciones son unívocas y bien definidas.

4.2.2 Ecuación de Langevin con término cuadrático en el ruido.

El procedimiento para obtener el funcional generador en este caso sigue exactamente los mismos pasos que el desarrollado anteriormente. Despejando ζ_n en (4.5)

[8]La libertad para elegir un esquema de discretización tiene su traducción, cuando se trabajo en el formalismo de operadores, en la libertad de que se dispone para ordenar los operadores al pasar del hamiltoniano clásico al cuántico. La equivalencia e ambos problemas fue estudiada por Langouche, Roekaerts y Tirapegui [97].

sin considerar el término cuadratico, y sustituyendo ${\zeta_n}^2$ por dicho valor elevado al cuadrado, la ecuación resultante es equivalente a la siguiente, salvo infinitésimos

$$\Delta_n = \varepsilon f(\tilde{q}_n) + h(\tilde{q}_n)\zeta_n + k(\tilde{q}_n){\Delta_n}^2 + \Theta(\varepsilon^{3/2}) \tag{4.24}$$

donde hemos definido $k(\tilde{q}_n) = g(\tilde{q}_n)h(\tilde{q}_n)^{-2}$. Sustituyendo esta expresión en (4.13) la única diferencia respecto al desarrollo anterior es que ahora aparecen términos con los siguientes factores, que no aparecían en aquél:

- ${\Delta_n}^3\varepsilon^{-1}$
- ${\Delta_n}^4\varepsilon^{-1}$
- ${\Delta_n}^6\varepsilon^{-2}$.

Para cada uno de ellos podemos aplicar una de las propiedades demostradas en el apéndice B, obteniéndose, como resultado final, un funcional generador con la misma forma que (4.21), pero en el que la función f se sustituye por $f + k$. Así pues, el efecto de los términos cuadráticos en la función ruido en una ecuación de Langevin es introducir una fuerza adicional que se suma a la original f. Esto lo hemos verificado tanto en su equivalente Fokker-Planck , como en su representación en términos de integrales de camino. Por lo tanto, a partir de ahora no haremos distinción entre estos dos tipos de términos, y una de las ambigüedades que planteabamos al principio del capítulo en el paso de una ecuación de Fokker-Planck a una de Langevin queda resuelta; la otra ha quedado aclarada también al fijar el convenio de discretización.

Comentario:

Tanto en el desarrollo de este apartado como en el de el anterior podemos preguntarnos como se modifica el resultado final si se incluyen en las correspondientes ecuaciones de Langevin términos proporcionales a Δ_n^m con $m \geq 3$. Este tipo de sumandos da una contribución nula al tomar el límite contínuo de la ecuación de Langevin, pero en principio no sabemos si afectan al funcional generador que hemos construido. Así, por ejemplo, para $m = 3$ se tienen dos nuevos sumandos con contribuciones no nulas para el lagrangiano asociado, provinientes, una del argumento de la exponencial, y la otra del jacobiano. Este hecho parece una inconsistencia, sin embargo, dejamos como ejercicio al lector, demostrar que ambas contribuciones son iguales en modulo y de signo contrario, por lo que se cancelan, y todo el proceso de construcción es consistente.

4.3 Transformaciones puntuales de variable.

4.3.1 Transformaciones de variable en la ecuación de Langevin.

Vamos a estudiar a continuación como se modifican las ecuaciones y funcionales generadores que hemos construido en los apartados anteriores ante cambios de variable puntuales. En particular, veremos como los cambios de variable puntuales en ecuaciones de Langevin no pueden realizarse de forma "naive" sino que es necesario discretizar y hacer las sustituciones cuidadosamente. Por otro lado comprobaremos la covarianza del funcional generador ante transformaciones puntuales de variable, condición ésta, que debe satisfacerse para garantizar la validez de la física que derivemos a partir de él.

Puesto que en el apartado anterior hemos demostrado la equivalencia en ecuaciones de Langevin entre el término cuadrático en el ruido y una fuerza adicional, consideraremos, sin pérdida de generalidad $g(q(t)) = 0$ en (4.5). Definimos el siguiente cambio de variables puntual:

$$q_i = \mathcal{F}(p_i) \tag{4.25}$$

En la ecuación de Langevin tenemos funciones de $\tilde{q}_i$ y Δ_i, veamos como se transforman ambas. Sea $F(\tilde{q}_i)$ una función genérica de $\tilde{q}_i$, sustituyendo (4.25) se tiene,

$$\begin{aligned} F(\tilde{q}_i) &= F(\alpha q_i + (1-\alpha)q_{i+1}) = F(\alpha\mathcal{F}(p_i) + (1-\alpha)\mathcal{F}(p_{i+1}))) \\ &= F\Big[\alpha\mathcal{F}(\tilde{p}_i) - \alpha(1-\alpha)\Delta_i\mathcal{F}'(\tilde{p}_i) + \tfrac{1}{2}{\Delta_i}^2\alpha(1-\alpha)^2\mathcal{F}''(\tilde{p}_i) - \ldots \\ &+(1-\alpha)\mathcal{F}(\tilde{p}_i) + \alpha(1-\alpha)\Delta_i\mathcal{F}'(\tilde{p}_i) + \tfrac{1}{2}{\Delta_i}^2\alpha^2(1-\alpha)\mathcal{F}''(\tilde{p}_i) + \ldots\Big] \\ &= F(\mathcal{F}(\tilde{p}_i)) + \tfrac{1}{2}\alpha(1-\alpha)\mathcal{F}''(\tilde{p}_i)F'(\mathcal{F}(\tilde{p}_i)){\Delta_i}^2 + \Theta({\Delta_i}^3) \end{aligned} \tag{4.26}$$

donde

$$\begin{aligned} \mathcal{F}'(\tilde{p}_i) &= \left.\frac{\partial\mathcal{F}(p_i)}{\partial p_i}\right|_{\tilde{p}_i} \\ \mathcal{F}''(\tilde{p}_i) &= \left.\frac{\partial^2\mathcal{F}(p_i)}{\partial p_i^2}\right|_{\tilde{p}_i} \end{aligned} \tag{4.27}$$

y se ha definido $\tilde{p}_i = \alpha p_i + (1-\alpha)p_{i+1}$ y $\bar{\Delta}_i = p_{i+1} - p_i$, por lo que en consecuencia:

$$\begin{aligned} p_i &= \tilde{p}_i - (1-\alpha)\bar{\Delta}_i \\ p_{i+1} &= \tilde{p}_i + \alpha\bar{\Delta}_i. \end{aligned} \tag{4.28}$$

Aplicando (4.25) a Δ_i, se tiene

$$\Delta_i = \mathcal{F}(\tilde{p}_{i+1}) - \mathcal{F}(\tilde{p}_i) = \bar{\Delta}_i \mathcal{F}'(\tilde{p}_i) + \frac{1}{2}(\alpha^2 - (1-\alpha)^2)\bar{\Delta}_i^2 \mathcal{F}''(\tilde{p}_i) + \Theta(\bar{\Delta}_i^3) \quad (4.29)$$

y llevando los dos desarrollos anteriores a la ecuación de Langevin (4.5),

$$\mathcal{F}'(\tilde{p}_i)\bar{\Delta}_i = \varepsilon f(\mathcal{F}(\tilde{p}_i)) + h(\mathcal{F}(\tilde{p}_i))\zeta_i - (\alpha - \frac{1}{2})\bar{\Delta}_i^2 \mathcal{F}''(\tilde{p}_i) + \Theta(\varepsilon^{3/2}) \quad (4.30)$$

y así, sustituyendo el término $\bar{\Delta}_i^2$ del segundo miembro consistentemente en función de ζ_i queda

$$\bar{\Delta}_i = \varepsilon \frac{f(\mathcal{F}(\tilde{p}_i))}{\mathcal{F}'(\tilde{p}_i)} + \left(\frac{1}{2} - \alpha\right) \frac{\mathcal{F}''(\tilde{p}_i) h(\mathcal{F}(\tilde{p}_i))^2}{\mathcal{F}'(\tilde{p}_i)^3} \zeta_i^2 + \frac{h(\mathcal{F}(\tilde{p}_i))}{\mathcal{F}'(\tilde{p}_i)} \zeta_i + \Theta(\varepsilon^{3/2}) \quad (4.31)$$

y en el límite contínuo

$$\dot{p} = \varepsilon \frac{f(p(t))}{\mathcal{F}'(p(t))} + \varepsilon \frac{\left(\frac{1}{2} - \alpha\right) \mathcal{F}''(p(t)) h(\mathcal{F}(p(t)))^2}{\mathcal{F}'(p(t))^3} + \frac{h(\mathcal{F}(p(t)))}{\mathcal{F}'(p(t))} \zeta(t) \quad (4.32)$$

donde hemos hecho uso de la propiedad anteriormente demostrada sobre los términos cuadráticos en el ruido.
Nótese que, para hacer el cambio de variables, en primer lugar se ha discretizado, después se han introducido las nuevas variables , y finalmente se ha vuelto al contínuo. Hagamos ahora el cambio $q = \mathcal{F}(p)$ directamente en $\dot{q} = f(q(t)) + h(q(t))\zeta(t)$.

$$\frac{dq}{dp}\frac{dp}{dt} = f(\mathcal{F}(p)) + h(\mathcal{F}(p))\zeta(t) \quad (4.33)$$

y por tanto,

$$\dot{p} = \frac{f(\mathcal{F}(p))}{\mathcal{F}'(p)} + \frac{h(\mathcal{F}(p))}{\mathcal{F}'(p)} \zeta(t). \quad (4.34)$$

El resultado de esta transformación no coincide con el correcto (4.32), diferenciándose del mismo en un sumando, que llamaremos *fuerza espúrea*. Así pues, la conclusión es que en la ecuación de Langevin, debido a la presencia de términos de orden $\varepsilon^{3/2}$, no es correcto hacer los cambios de variable puntuales de forma "naive" en el contínuo y es por tanto necesario ir al discreto y hacer las sustituciones como hemos indicado.

4.3.2 Transformaciones de variable puntuales en la ecuación de Fokker-Planck .

Consideremos la ecuación (4.10) escrita en términos de las variables q, e introduzcamos el cambio de variables definido anteriormente. Definiendo una nueva

función probabilidad en la forma natural $\bar{P}(p,t)dp = P(q,t)dq$ se tiene

$$\dot{\bar{P}}(p,t) = -\frac{\partial}{\partial p}\left[\frac{f(\mathcal{F}(p)) + (1-\alpha)h(\mathcal{F}(p))h'(\mathcal{F}(p))}{\mathcal{F}'(p)}\bar{P}(p,t) - \frac{1}{2\mathcal{F}'(p)}\frac{\partial}{\partial p}\frac{h(\mathcal{F}(p))^2}{\mathcal{F}'(p)}\bar{P}(p,t)\right] \tag{4.35}$$

expresando el segundo sumando como una derivada segunda y reagrupando,

$$\dot{\bar{P}}(p,t) = -\frac{\partial}{\partial p}\left[\frac{f(\mathcal{F}(p)) + (1-\alpha)h(\mathcal{F}(p))h'(\mathcal{F}(p))}{\mathcal{F}'(p)}\bar{P}(p,t) - \frac{1}{2}\frac{\mathcal{F}''(p)h(\mathcal{F}(p))^2}{\mathcal{F}'(p)^3}\bar{P}(p,t) - \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial p}\frac{h(\mathcal{F}(p))^2}{\mathcal{F}'(p)^2}\bar{P}(p,t)\right] \tag{4.36}$$

Es directo comprobar que ésta es precisamente la ecuación que se obtiene al aplicar a la ecuación de Langevin escrita en términos de las variables p (4.32), la misma transformación que lleva de (4.1) a (4.10). De este modo la relación entre ecuaciones de Langevin y Fokker-Planck es consistente ante transformaciones puntuales de variable.

4.3.3 Transformaciones de variable puntuales en el funcional generador.

Para completar esta sección vamos a calcular $Z[J]$ en términos de integrales de camino en las variables $p, \dot{p}$ a partir del mismo en función de $q, \dot{q}$, siendo nuevamente $q = \mathcal{F}(p)$. Consideremos el funcional generador (4.22) discretizado,

$$Z[J] = \int dq_0 P(q_0,t_0) \int \prod_{i=1}^{N} dq_i \frac{1}{(2\pi\varepsilon)^{1/2}} \prod_{i=0}^{N-1} \frac{1}{h(\tilde{q}_i)} \exp\left[-\frac{1}{2\varepsilon}\left(\left[q_{i+1} - q_i - \varepsilon f(\tilde{q}_i) + \varepsilon(1-\alpha)h(\tilde{q}_i)h'(\tilde{q}_i)\right]^2 \frac{1}{h(\tilde{q}_i)^2} + 2\varepsilon(1-\alpha)f'(\tilde{q}_i) + 2\varepsilon\tilde{q}_i J_i\right)\right] \tag{4.37}$$

Haciendo el cambio de variables (4.25), la propiedad (4.26) y desarrollando el factor j-ésimo del jacobiano de dicha transformación en torno al punto $\tilde{p}_{j+1}$ se tiene,

$$Z[J] = \int dp_0 \bar{P}(p_0,t_0) \int \prod_{i=1}^{N} dp_i \frac{1}{(2\pi\varepsilon)^{1/2}} \tag{4.38}$$

$$\prod_{i=0}^{N-1}\left[\mathcal{F}'(\tilde{p}_i)+\alpha\bar{\Delta}_i\mathcal{F}''(\tilde{p}_i)+\frac{1}{2}\alpha^2\bar{\Delta}_i^2\mathcal{F}'''(\tilde{p}_i)+...\right]$$
$$\left[h(\mathcal{F}(\tilde{p}_i))+\frac{1}{2}\bar{\Delta}_i^2\alpha(1-\alpha)h'(\mathcal{F}(\tilde{p}_i))\mathcal{F}''(\tilde{p}_i)+...\right]^{-1}$$
$$\exp\left[-\frac{1}{2\varepsilon}\left[\left(\mathcal{F}(\tilde{p}_i)+\alpha\bar{\Delta}_i\mathcal{F}'(\tilde{p}_i)+\frac{1}{2}\alpha^2\bar{\Delta}_i^2\mathcal{F}''(\tilde{p}_i)+\frac{1}{6}\alpha^3\bar{\Delta}_i^3\mathcal{F}'''(\tilde{p}_i)+...\right.\right.\right.$$
$$-\mathcal{F}(\tilde{p}_i)+(1-\alpha)\bar{\Delta}_i\mathcal{F}'(\tilde{p}_i)-\frac{1}{2}(1-\alpha)^2\bar{\Delta}_i^2\mathcal{F}''(\tilde{p}_i)+\frac{1}{6}(1-\alpha)^3\bar{\Delta}_i^3\mathcal{F}'''(\tilde{p}_i)+...$$
$$\left.-\varepsilon f(\mathcal{F}(\tilde{p}_i))+\varepsilon(1-\alpha)h(\mathcal{F}(\tilde{p}_i))h'(\mathcal{F}(\tilde{p}_i))\right)^2$$
$$\left[h(\mathcal{F}(\tilde{p}_i))+\frac{1}{2}\alpha(1-\alpha)\bar{\Delta}_i^2h(\mathcal{F}(\tilde{p}_i))h'(\mathcal{F}(\tilde{p}_i))\mathcal{F}''(\tilde{p}_i)+...\right]^{-2}$$
$$\left.+2\varepsilon(1-\alpha)f'(\mathcal{F}(\tilde{p}_i))+2\varepsilon\mathcal{F}(\tilde{p}_i)J_i\right]\Big] \tag{4.39}$$

donde se ha usado que $dq_0P(q_0,t_0)=dp_0\bar{P}(p_0,t_0)$. Tenemos ahora dos posibles formas de trabajar:

1. – Se desarrollan las exponenciales en series de potencias.
   – Se transforman $\bar{\Delta}_i^2$, $\bar{\Delta}_i^3$, $\bar{\Delta}_i^4$ y $\bar{\Delta}_i^6$ utilizando las relaciones del apéndice B. Al hacer la equivalencia de $\bar{\Delta}_i^3$ aparecen nuevos términos proporcionales a $\bar{\Delta}_i$.
   – Se suman estos nuevos términos a los ya existentes.
   – Se utiliza la propiedad

$$1+x=\exp(\log(1+x))\simeq\exp\left(x-\frac{x^2}{2}\right)\simeq\exp(x)(1-\frac{x^2}{2}) \tag{4.40}$$

   Con esto los términos lineales en $\bar{\Delta}_i$ aparecen en el argumento de la exponencial y aparecen términos adicionales proporcionales a$\bar{\Delta}_i^2$.
   – Se vuelve a aplicar las propiedades de equivalencia para transformar los nuevos sumandos.
   – Finalmente, todos los términos son proporcionales a ε y se vuelven a llevar al argumento de la exponencial.

2. La alternativa a éste proceso, es utilizar las equivalencias exponenciales demostradas en el segundo apartado del apéndice B. De hecho, el uso de dichas reglas se demuestra que es equivalente a seguir paso a paso el esquema del punto anterior. Vamos a seguir este segundo esquema que en este segundo procedimiento, que en este caso requiere menos cálculo.

Expresando los prefactores como exponenciales según (4.40) y reagrupando términos con la misma potencia de $\bar{\Delta}_i$ se tiene

$$Z[J] = \int dp_0 \bar{P}(p_0,t_0) \int \prod_{i=1}^{N} dp_i \frac{1}{(2\pi\varepsilon)^{1/2}}$$
$$\prod_{i=0}^{N-1} \frac{1}{h} \exp\left[-\frac{\bar{\Delta}_i}{2h^2}\left(-2\mathcal{F}' f + 2(1-\alpha)h'h\mathcal{F}' - 2\alpha\mathcal{F}''\mathcal{F}'^{-1}h^2 \right)\right.$$
$$+\frac{\bar{\Delta}_i^2}{2}\left((2\alpha-1)\mathcal{F}'' f h^{-2} - (2\alpha-1)(1-\alpha)\mathcal{F}'' h' h^{-1} + \alpha^2 \mathcal{F}''' \mathcal{F}'^{-1} \right.$$
$$\left. -\alpha(1-\alpha)\mathcal{F}'' h' h^{-1} - \alpha^2 \mathcal{F}''^2 \mathcal{F}'^{-2} \right) - \frac{\bar{\Delta}_i^3}{2\varepsilon h^2}\left((2\alpha-1)\mathcal{F}'\mathcal{F}'' \right)$$
$$-\frac{\bar{\Delta}_i^4}{2\varepsilon h^2}\left(\frac{1}{4}(2\alpha-1)^2\mathcal{F}''^2 + \frac{1}{3}(\alpha^3 + (1-\alpha)^3)\mathcal{F}'''\mathcal{F}' + \alpha(\alpha-1)\mathcal{F}'^2\mathcal{F}'' h' h^{-1} \right)$$
$$-\frac{1}{2\varepsilon}\left(\bar{\Delta}_i^2 \mathcal{F}'^2 h^{-2} + \varepsilon^2 f^2 h^{-2} + \varepsilon^2(1-\alpha)^2 h'^2 \right.$$
$$\left.\left. -2\varepsilon^2(1-\alpha) f h' h^{-1} + 2\varepsilon^2(1-\alpha) f' + 2\varepsilon^2 \mathcal{F} J \right)\right] \tag{4.41}$$

donde por simplificar la notación hemos omitido los argumentos de las funciones. Haciendo ahora las transformaciones del apéndice B

$$Z[J] = \int dp_0 \bar{P}(p_0,t_0) \int \prod_{i=1}^{N} dp_i \frac{1}{(2\pi\varepsilon)^{1/2}}$$
$$\prod_{i=0}^{N-1} \frac{1}{h} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\bar{\Delta}_i^2 \mathcal{F}'^2 h^{-2}\varepsilon^{-1} + (4\alpha-3)\bar{\Delta}_i \mathcal{F}''\mathcal{F}'^{-1} \right.\right.$$
$$+(2\alpha^2 - 3\alpha + 1)\varepsilon\mathcal{F}'''h^2\mathcal{F}'^{-3} + (\alpha-1)\varepsilon\mathcal{F}''h'h\mathcal{F}'^{-2} + \varepsilon f^2 h^{-2}$$
$$+(1-\alpha)^2\varepsilon h'^2 - 2\bar{\Delta}_i\mathcal{F}' f h^{-2} + 2(1-\alpha)\bar{\Delta}_i\mathcal{F}' h' h^{-1}$$
$$+\varepsilon(1-2\alpha)\mathcal{F}'' f \mathcal{F}'^{-2} - 2(1-\alpha)\varepsilon f h' h^{-1}$$
$$\left.\left. +2(1-\alpha)\varepsilon f' + \varepsilon\mathcal{F}''^2 h^2 \mathcal{F}'^{-4}(-2\alpha^2 + 3\alpha - \tfrac{3}{4}) + 2\varepsilon\mathcal{F}J \right)\right] \tag{4.42}$$

Por otro lado, consideramos el funcional generador asociado a (4.32). esto es, (4.21) donde

$$f \to \frac{f(\mathcal{F}) + \left(\frac{1}{2} - \alpha\right)\mathcal{F}''}{\mathcal{F}'} \tag{4.43}$$

$$h \to \frac{h(\mathcal{F})}{\mathcal{F}'} \tag{4.44}$$

Por simple comparación de los sumandos que aparecen en este funcional con (4.42) se comprueba que el resultado es el mismo, y consecuentemente el funcional generador (4.21) es covariante ante transformaciones de variable puntuales.

Capítulo 5

Teoría de campos: El modelo de dos temperaturas.

En éste capítulo, vamos a aplicar el esquema que hemos desarrollado hasta ahora a un modelo concreto, deduciendo, como resultado final, su comportamiento crítico. El esquema que seguimos es el siguiente:

- Escribiremos la ecuación maestra que define el modelo en términos de variables contínuas, con saltos discretos.
- Calcularemos su ecuación de Fokker-Planck asociada haciendo uso de los resultados del capítulo 2.
- Obtendremos el funcional generador asociado siguiendo el desarrollo del capítulo 4.
- Analizaremos mediante distintas técnicas el lagrangiano obtenido. En particular, estudiaremos la aproximación de punto silla, que nos permitirá obtener potenciales de no equilibrio y reinterpretar algunos de los resultados del capítulo 3, y desarrollos perturbativos, que permiten obtener los exponentes críticos del modelo.

Consideramos como sistema de prueba una versión contínua del modelo de Ising con dos temperaturas. En éste último actúan simultáneamente dos dinámicas, ambas obedeciendo una condición de balance detallado respecto a un mismo hamiltoniano, pero a distintas temperaturas: T_1 y T_2. De este modo se simula la presencia simultánea de dos baños térmicos en un sistema, que induce una situación de no equilibrio. Otras versiones de este modelo han sido previamente estudiadas en la literatura [1].

Resaltamos el hecho de que *muchos de los resultados que obtendremos en este*

[1] Véase, por ejemplo, [46, 52, 14].

capítulo son generales, o trivialmente generalizables, para otros modelos similares al considerado.

5.1 Definición del modelo y funcional generador asociado.

Sea un hamiltoniano contínuo, tipo Ginzsburg Landau, caso particular de (2.5) dado por

$$H^{\Omega}(\underline{\Phi},\underline{K}) = \Omega \int_{R^d} d\underline{r} \left[\frac{1}{2}\mu^2\underline{\Phi}^2(\underline{r}) + \frac{1}{2}(\nabla\underline{\Phi}(\underline{r}))^2 + \frac{1}{4!}\lambda\underline{\Phi}^4(\underline{r})\right] \tag{5.1}$$

siendo $\underline{K} \equiv (\mu,\lambda)$, $\mu_i = \mu_i(T_i)$, $i = 1,2$, y los demás parámetros independientes de la temperatura [2]. Del mismo modo que en el capítulo 2, este hamiltoniano puede interpretarse como el resultado de describir una ecuación maestra subyacente, dependiente de variables discretas de espín, en términos de variables promediadas en entornos locales [3] [4].

Por supuesto, en el hamiltoniano (5.1) pueden incluirse, términos de orden $\underline{\Phi}^6$ y superiores. Por simplicidad no los consideraremos aquí, y tomaremos directamente (5.1). El modelo queda definido por una ecuación maestra de la forma (2.6), con saltos discretos de la forma (2.7), siendo la función $f(\eta) = \frac{1}{2}(\delta(\eta-1) + \delta(\eta+1))$, (2.52), que corresponde a inversiones microscópicas de un espín. Las probabilidades de transición vienen definidas por (2.8), con

$$p(\underline{K}) = p\delta(\underline{K} - \underline{K}_1) + (1-p)\delta(\underline{K} - \underline{K}_2) \tag{5.3}$$

siendo $\underline{K}_i = (\mu_i,\lambda)$, $i = 1,2$, y cada una de las probabilidades elementales o de equilibrio viene dada por

$$w^{\Omega}(\underline{\Phi} \to \underline{\Phi}';\underline{K}_i) = D[H^{\Omega}(\underline{\Phi}',\underline{K}_i) - H^{\Omega}(\underline{\Phi},\underline{K}_i)] \tag{5.4}$$

[2] En el lenguaje de teoría de campos diríamos que tenemos una competición entre dos *masas* diferentes.

[3] Variables "coarse-grained."

[4] Puede entenderse también como una extensión del hamiltoniano de Ising. En efecto, si consideramos un modelo de espines más general, con interacciones tipo Ising, y definimos en cada nudo una variable de espín $s_{\underline{x}}$ distribuida como:

$$P(s_{\underline{x}}) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}\lambda_1 s_{\underline{x}}^2 - \lambda_2 s_{\underline{x}}^4\right) \tag{5.2}$$

el modelo de Ising original se recupera tomando el límite simultáneo $\lambda_1 \to -\infty$, $\lambda_2 \to \infty$ manteniendo $\lambda_1 = -4\lambda_2$ e incluyendo un factor factor constante por cada nudo, $(\lambda_2/\pi)^{1/2}\exp(-\lambda_2)$ [170, 138].

donde la función D cumple las propiedades (1.8).
De este modo tenemos dos dinámicas en competición, caracterizada cada una de ellas por una temperatura diferente.
Nótese que el modelo tal y como lo hemos definido, tiene una dependencia explícita en la forma de las probabilidades de transición. Es precisamente esta dependencia la que pretendemos "rastrear" para determinar, por ejemplo, su influencia en el comportamiento crítico. El modelo que hemos definido es, por tanto, suficiente, para nuestros propósitos.

5.1.1 Fokker-Planck y funcionales generadores.

Sin más que aplicar el resultado del tercer teorema del capítulo 2 a la ecuación maestra que define el modelo obtenemos una ecuación de Fokker-Planck ,

$$\partial_t P_t^{\Omega}(\underline{\Phi}) = \frac{1}{\Omega}\int_{R^d} d\underline{r}\frac{\partial}{\partial\underline{\Phi}(\underline{r})}\left[\Xi_0(\underline{\Phi}(\underline{r})) + \frac{1}{\Omega}\Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r}))\frac{\partial}{\partial\underline{\Phi}(\underline{r})}\right] P_t^{\Omega}(\underline{\Phi}) \qquad (5.5)$$

con los coeficientes dados por (2.50), con (2.51), (2.52), (5.3) y (5.4).
En particular, para dos posibles formas de las probabilidades de transición, se tiene:

- Dinámica de V.B.S. (1.13).

$$\Xi_0(\underline{\Phi}(\underline{r})) = \exp(-\nabla^2_{\underline{r}}\underline{\Phi}(\underline{r}) + \lambda\underline{\Phi}^3(\underline{r}))\,[p\exp(\mu_1^2\underline{\Phi}(\underline{r})) + (1-p)\exp(\mu_2^2\underline{\Phi}(\underline{r}))]$$
$$-\frac{1}{2}\exp(\nabla^2_{\underline{r}}\underline{\Phi}(\underline{r}) - \lambda\underline{\Phi}^3(\underline{r}))\,[p\exp(-\mu_1^2\underline{\Phi}(\underline{r})) + (1-p)\exp(-\mu_2^2\underline{\Phi}(\underline{r}))] \qquad (5.6)$$

y

$$-\frac{\Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r}))}{\Xi_0(\underline{\Phi}(\underline{r}))} = \frac{1}{2}(\mu_1^2+\mu_2^2)\underline{\Phi}(\underline{r}) - \nabla^2_{\underline{r}}\underline{\Phi}(\underline{r}) + \lambda\underline{\Phi}^3(\underline{r})$$
$$-2arctanh\left((2p-1)\tanh\left(\frac{\mu_2^2-\mu_1^2}{4}\underline{\Phi}(\underline{r})\right)\right) \qquad (5.7)$$

- Dinámica de Glauber (1.11)

$$\Xi_0(\underline{\Phi}(\underline{r}) = 2p\tanh(z_1(\underline{\Phi}(\underline{r}))) + 2(1-p)\tanh(z_2(\underline{\Phi}(\underline{r}))) \qquad (5.8)$$

y

$$\frac{\Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r}))}{\Xi_0(\underline{\Phi}(\underline{r}))} = log\left[\frac{1+p\tanh(z_1(\underline{\Phi}(\underline{r}))) + (1-p)\tanh(z_2(\underline{\Phi}(\underline{r})))}{1-p\tanh(z_1(\underline{\Phi}(\underline{r})))) - (1-p)\tanh(z_2(\underline{\Phi}(\underline{r})))}\right] \qquad (5.9)$$

con

$$z_i(\underline{\Phi}(\underline{r})) \equiv \mu_i^2\underline{\Phi}(\underline{r}) - \nabla^2_{\underline{r}}\underline{\Phi}(\underline{r}) + \lambda\underline{\Phi}^3(\underline{r}), \qquad i=1,2. \qquad (5.10)$$

y donde hemos absorbido un factor común $1/2\Omega$ en la escala temporal.

Para construir el funcional generador asociado a esta ecuación de Fokker-Planck , la escribimos primero en una forma más estándar, correspondiente a la extensión de la ecuación (4.10) para un contínuo de variables,

$$\partial_t P_t^{\Omega}(\underline{\Phi}) = \int_{R^d} d\underline{r} \quad \frac{\partial}{\partial \underline{\Phi}(\underline{r})} \left[\left(\Xi_0(\underline{\Phi}(\underline{r})) - \frac{1}{\Omega} \Xi_2'(\underline{\Phi}(\underline{r})) \right) P_t^{\Omega}(\underline{\Phi}) \right] + \frac{1}{\Omega} \frac{\partial^2}{\partial \underline{\Phi}^2(\underline{r}))} \left[\Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r})) P_t^{\Omega}(\underline{\Phi}) \right] . \tag{5.11}$$

Haciendo las identificaciones pertinentes, podemos escribir el funcional generador, (4.22), como

$$Z[\underline{J}(\underline{r},t)] = \int \mathcal{D}\underline{\Phi}(\underline{r},t) \exp\left\{ - \int dt \mathcal{L}(\underline{\Phi}(\underline{r},t), \dot{\underline{\Phi}}(\underline{r},t)) \right\} \tag{5.12}$$

con

$$\mathcal{L}(\underline{\Phi}(\underline{r},t), \dot{\underline{\Phi}}(\underline{r},t)) = \frac{1}{2} \int_{R^d} d\underline{r} \Big\{ \frac{\Omega}{2\Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r},t))} \left[\dot{\underline{\Phi}}(\underline{r},t) + \Xi_0(\underline{\Phi}(\underline{r},t)) + \frac{(1-2\alpha)}{\Omega} \Xi_2'(\underline{\Phi}(\underline{r},t)) \right]^2 + 2(1-\alpha) \left[-\Xi_0'(\underline{\Phi}(\underline{r},t)) + \frac{\alpha}{\Omega} \Xi_2''(\underline{\Phi}(\underline{r},t)) \right] - 2\underline{\Phi}(\underline{r},t) \underline{J}(\underline{r},t) \Big\}. \tag{5.13}$$

La exponencial de menos la acción asociada a este lagrangiano representa la probabilidad de que, dada una cierta configuración inicial, el sistema siga un cierta camino especificado por $\{\underline{\Phi}(\underline{r},t)\}_{t_0}^{t_1}$ en el intervalo de tiempo $[t_0, t_1]$. En lo que sigue consideraremos $t_0 \to -\infty$ para restringirnos a probabilidades estacionarias (véase capítulo 4). Es importante notar que aunque la ecuación de Fokker-Planck que hemos construido no es exacta, y consecuente el funcional generador tampoco, por uno de los teoremas demostrados en el capítulo2, tanto los extremos de la distribución estacionaria, como las fluctuaciones en tornoa ellos son exactamente descritos en los dos primeros órdenes en Ω. Consecuentemente, *el funcional generador que acabamos de construir es adecuado para analizar cambios de fase, pues éstos se corresponden con inestabilidades en los puntos donde nuestro método es exacto.*

Vamos a considerar, por concretar, un valor particular del parámetro de discretización, $\alpha = 1/2$, lo cual corresponde la interpretación de Stratonovich y es la usada más frecuentemente en la bibliografía. Cualquier otra elección es, por supuesto posible y, por ejemplo, la teoría perturbativa que desarrollamos debe ser independiente de ella [97].

El funcional generador anterior es demasiado complejo como para ser tratado perturbativamente. Por ejemplo, hay problemas en aquellos puntos en que el funcional

$\Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r},t))$ se anula, pues aparecen singularidades. Un truco de cálculo muy útil en este contexto, consiste en introducir unas nuevas variables campo adicionales. Estas fueron consideradas por primera vez por Martin, Siggia y Rose en [114], y en el contexto de la formulación lagrangiana, por Janssen en [82, 83]. Consideremos la transformación gaussiana [176],

$$\int \prod_{i=1}^{n} dx_i \exp\left(-\sum_{i,j=1}^{n} \frac{1}{2} x_i A_{ij} x_j + \sum_{i=1}^{n} b_i x_i\right) = (2\pi)^{n/2} (\det \underline{A})^{-1/2} \exp\left(\frac{1}{2} b_i (\underline{A}^{-1})_{ij} b_j\right) \tag{5.14}$$

donde $\underline{A}$ es una matriz simétrica, formada por los elementos A_{ij}, con autovalores λ_i tales que:

$$Re(\lambda_i) \geq 0, \qquad \lambda_i \neq 0. \tag{5.15}$$

Esta igualdad sigue siendo válida para un conjunto de variables contínuo (variables de espacio-temporales), sin más que sustituir, x_i por $x(\underline{r},t)$, b_i por $b(\underline{r},t)$, A_{ij} por el operador $A(\underline{r},\underline{r}',t)$ y el productorio discreto de integrales por una integral funcional. De este modo haciendo las siguientes identificaciones

$$\begin{aligned} A^{-1}(\underline{r},\underline{r}',t) &\rightarrow -\frac{1}{2}\Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r},t))\delta_{\underline{r},\underline{r}'} \\ x(\underline{r},t) &\rightarrow \underline{\Psi}(\underline{r},t) \\ b(\underline{r},t) &\rightarrow [\dot{\underline{\Phi}}(\underline{r},t) + \Xi_0(\underline{\Phi}(\underline{r},t))]. \end{aligned} \tag{5.16}$$

y aplicando la transformación gaussiana al funcional generador, (5.12), queda

$$Z[\underline{J}(\underline{r},t)] = \int \mathcal{D}\underline{\Phi}(\underline{r},t)\mathcal{D}\underline{\Psi}(\underline{r},t) \exp \int dt\ \Im(\underline{\Phi}(\underline{r},t),\underline{\Psi}(\underline{r},t)) \tag{5.17}$$

$$\begin{aligned} \Im = \int_{R^d} d\underline{r} \Big[&\frac{1}{\Omega}\underline{\Psi}^2(\underline{r},t)\Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r},t)) \\ &-\underline{\Psi}(\underline{r},t)\left[\dot{\underline{\Phi}}(\underline{r},t) + \Xi_0(\underline{\Phi}(\underline{r},t))\right] + \frac{1}{2}\Xi_0'(\underline{\Phi}(\underline{r},t)) \\ &-\frac{1}{4\Omega}\Xi_2''(\underline{\Phi}(\underline{r},t)) + \underline{\Phi}(\underline{r},t)\underline{J}(\underline{r},t)\Big] \end{aligned} \tag{5.18}$$

donde los factores 2π y el determinante de $\underline{A}$ se han absorbido en la medida, de forma análoga a como se hizo en (4.23).
A los nuevos campos, $\underline{\Psi}$, que hemos introducido se les denomina *campos respuesta.* Veamos porqué.

5.1.2 Campos respuesta.

Sea una ecuación de Langevin escrita en la forma,

$$\dot{\underline{\Phi}}(\underline{r},t) = G_1(\underline{\Phi}(\underline{r},t)) + G_2(\underline{\Phi}(\underline{r},t))\zeta(\underline{r},t). \tag{5.19}$$

siendo ζ un ruido blanco gaussiano. Si añadimos un término dependiente del tiempo $h(t,\underline{r})$ a (5.19), la variación de las funciones de correlación

$$G^{(n)}(\underline{r}_1,t_1,\underline{r}_2,t_2,...,\underline{r}_n,t_n) \equiv < \underline{\Phi}(\underline{r}_1,t_1)\underline{\Phi}(\underline{r}_2,t_2)...\underline{\Phi}(\underline{r}_n,t_n) >, \tag{5.20}$$

donde $< ... >$ representa promedios sobre el ruido, ante cambios en $h(t_0)$ viene dada por

$$R^{(n)}(\underline{r}_0,t_0,\underline{r}_1,t_1,\underline{r}_2,t_2,...,\underline{r}_n,t_n) \equiv \frac{\partial}{\partial h(t_0,\underline{r}_0)} G^{(n)}(\underline{r}_1,t_1,\underline{r}_2,t_2,...,\underline{r}_n,t_n)\Big|_{h=0}. \tag{5.21}$$

A esta función se le conoce con el nombre de *función respuesta*, y representa como "responde" la ecuación de Langevin ante la inclusión de una fuerza adicional. Por causalidad debe cumplirse que $R^{(n)}(t_0,\underline{r}_1,t_1,\underline{r}_2,t_2,...,\underline{r}_n,t_n) = 0$ si $t_0 > t_i \; \forall (1 \leq i \leq n)$. Pueden definirse otras funciones respuesta más complicadas, incluyendo otras derivadas respecto a los campos h a tiempos diferentes [111, 176]. Consideremos ahora la ecuación de Langevin asociada a (5.11) con la interpretación de Stratonovich. Añadámosle una fuerza $h(\underline{r},t)$. Calculando el funcional generador asociado a la nueva Langevin, se obtiene una expresión análoga a (5.17), salvo por un sumando adicional en el argumento de las integrales en la exponencial, de la forma $\underline{\Psi}(\underline{r},t)h(\underline{r},t)$. De este modo al derivar las correlaciones obtenidas a partir del funcional, respecto a $h(\underline{r}_0,t_0)$, y evaluar en $h = 0$, se tiene $< \underline{\Psi}(\underline{r}_0,t_0)\underline{\Phi}(\underline{r}_1,t_1)\underline{\Phi}(\underline{r}_2,t_2)...\underline{\Phi}(\underline{r}_n,t_n) >$, donde el promedio ahora se considera en el sentido de la integral funcional. Esta expresión debe de coincidir con la función respuesta. Cualquier función respuesta podrá escribirse como un promedio en la integral funcional de los dos tipos de campos que tenemos. De ahí que a $\underline{\Psi}(\underline{r},t)$ se le llame campo respuesta [5].

[5] La interpretación de los campos $\underline{\Psi}$ como campos respuesta no es tan directa en cualquier caso; por ejemplo, si hubiesemos considerado el funcional generador (4.21), en lugar de (4.22), y hubiésemos hecho la transformación gaussiana directamente sobre él la interpretación de los campos sería diferente. En particular, al derivar el funcional generador respecto a $h(\underline{r},t_0)$ no se obtendrían funciones respuesta, sino éstas acopladas a otras funciones de correlación. Dejamos la comprobación de este hecho como ejercicio.

5.2 Dimensiones y límite de equilibrio.

Vamos a explicitar las dimensiones de los diferentes términos que aparecen en los funcionales generadores.

$$\begin{aligned} [\Xi_0] &= [\eta][\tau]^{-1} \\ [\Xi_2] &= [\eta]^2[L]^d[\tau]^{-1} \end{aligned} \tag{5.22}$$

donde η tiene dimensiones de campo Φ, L representa la dimensión espacial, y τ la temporal. El argumento de las funciones $\Xi_0(z)$ y $\Xi_2(z)$ es adimensional, y podemos escribirlo como $[z] = [\delta H^\Omega/\delta\underline{\Phi}][\eta][L]^d$, donde H^Ω corresponde a (5.1). Definimos dos parámetros, γ y κ, con dimensiones $[\gamma] = [\eta][L]^d$ y $[\kappa] = [\eta]^2[L]^d[\tau]^{-1}$ respectivamente y modulo uno en las unidades en las que trabajamos.
Consideremos ahora uno de los límites de equilibrio de nuestro modelo, por ejemplo $p = 1$. Si omitimos el factor Ω en el hamiltoniano (5.1), desarrollamos Ξ_0 y Ξ_2 en potencias de Ω, y consideramos sólo la contribución dominante, el funcional (4.22) en ausencia de campo y con la notación anterior queda:

$$\Im = \int_{R^d} d\underline{r}\left[\kappa\underline{\Psi}^2(\underline{r},t) - \underline{\Psi}(\underline{r},t)\left[\dot{\underline{\Phi}}(\underline{r},t) + \kappa\frac{\delta H(\underline{\Phi})}{\delta\Phi(\underline{r},t)}\right] + \frac{1}{2}\kappa\frac{\delta^2 H(\underline{\Phi})}{\delta\Phi^2(\underline{r},t)}\right]. \tag{5.23}$$

Este es el funcional de Bausch-Janssen-Wagner, [9] introducido por estos autores para estudiar dinámica crítica de equilibrio mediante la renormalización de una teoría de campos [6]. Nótese que las consideraciones que hemos hecho para reproducir este funcional, son las mismas que hizimos en el capítulo 2 para obtener el modelo A de Hohenberg y Halperin, [74]. Dicho de otro modo, *el funcional (5.23) es el generador de las correlaciones dinámicas para el modelo A, y en cualquier caso puede obtenerse como un caso particularmente simple de nuestro funcional más general.*

5.3 Aproximación semiclásica o de punto silla.

Dado un cierto funcional generador es imposible, en general, resolverlo de forma exacta. Los dos métodos aproximados más usuales y fructíferos que se pueden considerar para estudiarlo son las aproximaciones semiclásicas o de punto de silla [7] [176, 144, 20, 134, 6], y los desarrollos en series perturbativas [176, 6, 13]. En lo que resta de este capítulo vamos a considerar estas dos alternativas para tratar nuestro funcional en forma genérica, comenzando por la primera.

[6] Aquí no consideramos el término de precesión de Larmor en un campo magnético local incluido adicionalmente por estos autores, pero esto no resta generalidad a nuestro razonamiento.

[7] Otros sinónimos son "steepest descent" o W.B.K.

Sea pues (5.5). Si consideramos el límite estricto $\Omega \to \infty$, ésta se reduce a la ecuación de evolución determinista, dada por

$$< \dot{\underline{\Phi}}(\underline{r},t) >= -\Xi_0(< \underline{\Phi}(\underline{r},t) >). \tag{5.24}$$

y la distribución de probabilidad es una delta de Dirac [8]. Sin embargo, este límite es singular, en el mismo sentido en que el límite clásico ($\hbar = 0$) de la mecánica cuántica lo es [176]. La aproximación semiclásica consiste en suponer Ω tendiendo a infinito, pero no estrictamente divergente. De este modo, si consideramos el funcional generador, escrito en la primera forma que obtuvimos, (5.12), y separamos en él los distintos órdenes en Ω,

$$\begin{aligned} Z[\underline{J}(\underline{r},t)] = \int \mathcal{D}\underline{\Phi}(\underline{r},t) \exp - \int dt \Big[\Omega \mathcal{L}_0(\underline{\Phi}(\underline{r},t), \dot{\underline{\Phi}}(\underline{r},t)) \\ + \mathcal{L}_1(\underline{\Phi}(\underline{r},t), \dot{\underline{\Phi}}(\underline{r},t)) + \underline{\Phi}(\underline{r},t)\underline{J}(\underline{r},t) + \Theta(\Omega^{-1}) \Big], \end{aligned} \tag{5.25}$$

éste se puede aproximar por

$$\begin{aligned} Z[\underline{J}(\underline{r},t)] = \exp \Big\{ - \int dt \Big[\Omega \mathcal{L}_0(\underline{\Phi}^*, \dot{\underline{\Phi}}^*) \\ + \mathcal{L}_1(\underline{\Phi}^*, \dot{\underline{\Phi}}^*) + \underline{\Phi}^* \underline{J} + \Theta(\Omega^{-1} \Big] \Big\} \\ \int \mathcal{D}\underline{\Upsilon}(\underline{r},t) \exp \Big\{ \frac{1}{2} \int dt \int dt' \left. \frac{\delta^2 \mathcal{L}_0(\underline{\Phi}, \dot{\underline{\Phi}})}{\delta \underline{\Phi}(\underline{r},t) \delta \underline{\Phi}(\underline{r}',t')} \right|_{\underline{\Phi}=\underline{\Phi}^*} \underline{\Upsilon}(\underline{r},t) \underline{\Upsilon}(\underline{r}',t') \Big\} \end{aligned} \tag{5.26}$$

siendo,

$$\underline{\Phi}(\underline{r},t) = \underline{\Phi}^*(\underline{r},t) + \Omega^{-1/2} \underline{\Upsilon}(\underline{r},t) \tag{5.27}$$

y $\underline{\Phi}^*(\underline{r},t)$ representa un camino, extremal de la acción en primer orden, esto es, una solución de la ecuación

$$\delta \mathcal{A}_0 = \delta \left(\int dt [\mathcal{L}_0(\underline{\Phi}(\underline{r},t)) - \underline{\Phi}(\underline{r},t) \underline{J}_0(\underline{r},t)] \right) = 0 \tag{5.28}$$

donde utilizado el desarrollo

$$\underline{J} = \Omega \underline{J}_0 + \underline{J}_1 + \Theta(\Omega^{-1}). \tag{5.29}$$

Como es bien sabido en teoría de campos, tomando primero el logaritmo neperiano del funcional generador y calculando despues su transformada de Legendre se obtiene un funcional $\Gamma(\{\underline{\Phi}(\underline{r},t)\}_{t=-\infty}^{t_f})$, que a veces se denomina *potencial efectivo* [9]. Dependiendo de la forma de la fuente $\underline{J}(\underline{r},t)$ que se considere la interpretación de

[8] Véase capítulo 2.

[9] Se suele utilizar este nombre para el potencial evaluado en espacio recíproco de Fourier, con todos los momentos igualados a cero. Aquí lo usaremos en un sentido más amplio.

Γ será diferente. Así, por ejemplo, tomando $\underline{J}(\underline{r},t) = \underline{J}(\underline{r})\delta(t-t_f)$, $\log(Z(\underline{J}))$ sólo depende de la función $\underline{J}(\underline{r})$ en un cierto tiempo t_f. Su transformada de Legendre, Γ, depende sólo del campo en ese tiempo final, y por lo tanto es un potencial, y genera la probabilidad estacionaria (pues $t_0 \to -\infty$) de que el sitema alcance una configuración $\underline{\Phi}(\underline{r})$. Una fuente con n deltas de Dirac a tiempos distintos genera una función $\Gamma^{(n)} = \Gamma(\underline{\Phi}(\underline{r}_1,t_1),...,\underline{\Phi}(\underline{r}_n,t_n))$ que se puede interpretar como un potencial efectivo para correlaciones estacionarias a n tiempos [56].
Vamos a calcular el potencial efectivo Γ, en el orden más bajo en algunos casos sencillos. Veremos que existe una conexión entre este potencial y los potenciales que calculamos en el capítulo 3.

5.3.1 Cálculo del potencial efectivo.

Desarrollando explícitamente (5.28) se tiene,

$$\int_{R^d} d\underline{r} \int_{-\infty}^{t_f} dt \left[\frac{\delta \mathcal{L}_0}{\delta \underline{\Phi}(\underline{r},t)} \delta\underline{\Phi}(\underline{r},t) - \frac{d}{dt} \frac{\delta \mathcal{L}_0}{\delta \dot{\underline{\Phi}}(\underline{r},t)} \right] \delta\underline{\Phi}(\underline{r},t) + \frac{\delta \mathcal{L}_0}{\delta \dot{\underline{\Phi}}(\underline{r},t)} \Big|_{-\infty}^{t_f} \delta\dot{\underline{\Phi}}(\underline{r},t) = 0. \tag{5.30}$$

Fijados los extremos, y al ser independientes las variaciones en cada punto espacial, y para cada tiempo, se tiene el siguiente conjunto de ecuaciones de Euler-Lagrange,

$$\frac{\delta \mathcal{L}_0}{\delta \underline{\Phi}(\underline{r},t)} \delta\underline{\Phi}(\underline{r},t) - \frac{d}{dt} \frac{\delta \mathcal{L}_0}{\delta \dot{\underline{\Phi}}(\underline{r},t)} = 0 \tag{5.31}$$

y la ligadura

$$\frac{\delta \mathcal{L}_0}{\delta \dot{\underline{\Phi}}(\underline{r},t)} \Big|^{t_f} = 0. \tag{5.32}$$

Llevando (5.31) y (5.32) a (5.13), y tomndo $\underline{J}_0(\underline{r},t) = \underline{J}_0(\underline{r})\delta(t-t_f)$ se tiene,

$$\begin{aligned} \dot{\underline{\Pi}}(\underline{r},t) &= \underline{\Pi}(\underline{r},t)\Xi_0'(\underline{\Phi}(\underline{r},t)) - \underline{\Pi}^2(\underline{r},t)\Xi_2'(\underline{\Phi}(\underline{r},t)) \\ \dot{\underline{\Phi}}(\underline{r},t) &= 2\underline{\Pi}(\underline{r},t)\Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r},t)) - \Xi_0(\underline{\Phi}(\underline{r},t)) \end{aligned} \tag{5.33}$$

donde hemos definido las variables conjugadas

$$\underline{\Pi}(\underline{r},t) \equiv \frac{\delta \mathcal{L}_0}{\delta \dot{\underline{\Phi}}(\underline{r},t)} = \frac{1}{2\Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r},t)))} \left[\dot{\underline{\Phi}}(\underline{r},t) + \Xi_0(\underline{\Phi}(\underline{r},t)) \right], \tag{5.34}$$

con la condición de contorno $\underline{\Pi}(\underline{r},t_f) = \underline{J}_0(\underline{r})$. Nótese que (5.33) es un conjunto de ecuaciones de Hamilton Jacobi , que son canónicas respecto de un cierto hamiltoniano, esto es, pueden expresarse como

$$\begin{aligned} \dot{\underline{\Phi}}(\underline{r},t) &= \frac{\delta \mathcal{H}(\underline{\Phi},\underline{\Pi})}{\underline{\Pi}(\underline{r},t)} \\ \dot{\underline{\Pi}}(\underline{r},t) &= -\frac{\delta \mathcal{H}(\underline{\Phi},\underline{\Pi})}{\underline{\Phi}(\underline{r},t)} \end{aligned} \tag{5.35}$$

con

$$\mathcal{H} = \int_{R^d} d\underline{r} \left[\underline{\Pi}^2 \Xi_2 - \underline{\Pi} \Xi_0 \right]. \tag{5.36}$$

Es sencillo verificar que este hamiltoniano es la transformada de Legendre de $\mathcal{L}_0$ y coincide con el término proporcional a Ω en (5.18), obtenido tras hacer una transformación gaussiana.
Igualmente, es directo comprobar que el hamiltoniano obtenido de este modo es el mismo que aparecía en los capítulos 2 y 3 al sustituir la forma de la distribución estacionaria esperada en la ecuación de Fokker-Planck . De este modo, observamos que los potenciales efectivos calculados de este modo representan la misma estructura matemática que los calculados en el capítulo 3. En particular, *bajo esta nueva perspectiva, la interpretación del potencial estacionario en cada punto es más clara: viene determinado por la probabilidad de que ocurra la fluctuación más probable que lleve al sistema desde algún mínimo determinista a dicho punto, pesada por la profundidad relativa del mínimo en cuestión.*

Caso de equilibrio.

En el caso de equilibrio los coeficientes de la ecuación de Fokker-Planck verifican la relación $\Xi_2(z(\underline{r})) = \Xi_0(z(\underline{r}))/z(\underline{r})$ siendo $z(\underline{r})$ la derivada del hamiltoniano respecto al campo en el punto $\underline{r}$ [10]. Gracias a esta propiedad podemos resolver exactamente el sistema de ecuaciones de Hamilton Jacobi (5.33). En efecto, tomamos como hipótesis $\underline{\Pi}(\underline{r}) = z(\underline{r})$ para todo tiempo, y la sustituimos en (5.33). Para cada posición $\underline{r}$ las ecuaciones de evolución de $\underline{\Phi}(\underline{r},t)$ y $\underline{\Pi}(\underline{r},t)$ se reducen a una misma expresión: $\dot{\underline{\Phi}}(\underline{r},t) = \Xi_O(\underline{\Phi}(\underline{r},t))$ que junto con la ecuación que define la hipótesis constituyen un nuevo sistema de ecuaciones, equivalente a (5.33), pero en el que la evolución de las variables $\underline{\Phi}$ está desacoplada de las variables $\underline{\Pi}$. La integración del sistema lleva a,

$$\begin{aligned}
\log(Z[J]) &= -\int d\underline{K} \int dt \left[\underline{\Pi}^2(\underline{K},t)\Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r},t)) - \underline{J}_0(\underline{K},t)\underline{\Phi}(\underline{r},t) \right] \\
&= -\int d\underline{K} \int dt \left[z(\underline{K},t)\Xi_0(\underline{\Phi}(\underline{r},t)) - \underline{J}_0(\underline{K},t)\underline{\Phi}(\underline{r},t) \right] \\
&= -\int d\underline{K} \int dt \left[z(\underline{K},t)\dot{\underline{\Phi}}(\underline{r},t) - \underline{J}_0(\underline{K},t)\underline{\Phi}(\underline{r},t) \right] \\
&= -H[\underline{\Phi}] + \int d\underline{K} \underline{J}_0(\underline{K},t)\underline{\Phi}(\underline{r},t)
\end{aligned} \tag{5.37}$$

cuya transformada de Legendre es $\Gamma(\underline{\Phi}) = H(\underline{\Phi})$. De este modo hemos reproducido para nuestro funcional dinámico una propiedad bien conocida en el caso estático:

[10] Véase capítulo 2.

el potencial efectivo en primer orden de una aproximación de punto silla coincide con el hamiltoniano clásico. En particular, para el funcional (5.23) se obtiene como potencial efectivo el hamiltoniano (5.1) (sin el factor Ω).

Caso de no equilibrio.

En este caso, como puede comprobarse fácilmente, una hipótesis como la relizada en el caso anterior, $\underline{\Pi}(\underline{r}) = z(\underline{r})$, no es consistente en general. De hecho, sustituyendo la relación de la hipótesis en (5.33) es directo comprobar que, si el denominador de Ξ_2, (2.50), satisface la condición de potencialidad (véase apéndice C), entonces se tiene consistencia y el sistema puede ser simplificado como en el caso de equilibrio. Así, para situaciones de no-equilibrio, donde dicho denominador no satisface una condición de potencialidad (pues eso implicaría balance detallado) no tenemos un método eficaz para separar las variables campo de los momentos e integrar de un modo directo. Por tanto la única alternativa que resta es integrar el sistema (5.33), mediante técnicas perturbativas o numéricas. No abordaremos aquí ese problema, que para un sistema de dos variables ya estudiamos en el capítulo 3.

Ordenes superiores.

Concluido el cálculo del potencial en el orden más bajo, es posible calcular órdenes superiores. Para ello es necesario evaluar (5.26). En el orden siguiente al dominante hay dos contribuciones: una proviniente de evaluar $\mathcal{L}_1$ a lo largo de las trayectorias extremales de $\mathcal{A}_0$, y el segundo correspondiente a la integral gaussiana en las variables $\underline{\Upsilon}$ en (5.26). Técnicas para evaluar esta integral pueden encontrarse en la literatura [144, 176, 66, 19].

5.4 Desarrollos perturbativos.

La herramienta más poderosa para tratar funcionales generadores que no pueden tratarse de forma exacta consiste en introducir desarrollos perturbativos. Estos han conducido a resultados notables tanto en el marco de la teoría cuántica de campos como de la mecánica estadística [176, 138, 144, 143, 6]. Presentan matemáticamente graves dificultades, sin embargo, a falta de un formalismo más riguroso con el que operar se utilizan con profusión. En el contexto de la teoría de fenómenos críticos de equilibrio, han permitido obtener, por ejemplo, exponentes críticos con bastante precisión.
En esta sección vamos a estudiar el desarrollo perturbativo del funcional generador definido por (5.17) y (5.18). Lo aplicaremos a los casos de equilibrio y no equilibrio, calculando en particular los exponentes críticos asociados.

Para comenzar el desarrollo separamos la parte cuadrática de la acción, exactamente resoluble, de la parte no cuadrática que trataremos perturbativamente. Desarrollando $\Im$, (5.18), en series de potencias de $\underline{\Phi}$ y $\underline{\Psi}$ se tiene

$$\begin{aligned}\Im = \int_{R^d} d\underline{r} \int dt \Big\{ & \underline{\Psi}^2(\underline{r},t)\kappa \sum_{n=0}^{\infty} \left[c_2^{(2n)} \underline{\Phi}^{2n}(\underline{r},t) \right] \\ & -\underline{\Psi}(\underline{r},t) \left[\dot{\underline{\Phi}}(\underline{r},t) + \kappa \sum_{n=0}^{\infty} \left[c_0^{(2n+1)} \underline{\Phi}^{2n+1}(\underline{r},t) \right] \right] \\ +\frac{1}{2}\kappa \sum_{n=0}^{\infty} \left[(2n+1) c_0^{(2n+1)} \underline{\Phi}^{2n} \right] & + \frac{1}{4} \sum_{n=0}^{\infty} \left[(2n)(2n-1) c_2^{(2n)} \underline{\Phi}^{2n-2}(\underline{r},t) \right] \Big\} \end{aligned} \tag{5.38}$$

donde hemos definido de

$$c_i^{(m)} = \frac{1}{\kappa m!} \left. \frac{\delta^m \Xi_i(\underline{\Phi}(\underline{r}))}{\delta \Phi^m(\underline{r})} \right|_{\underline{\Phi}=\underline{0}} \qquad i = 1,2. \tag{5.39}$$

5.4.1 Teoría libre.

Tomamos como parte exactamente resoluble, o teoría libre, escrita en el espacio de momentos, los términos cuadráticos siguientes:

$$\Im_0 = \int_{R^d} d\underline{q} \int dt \Big\{ \kappa\Omega \underline{\Psi}^2(\underline{q},t) - \underline{\Psi}(\underline{q},t) \left[\dot{\underline{\Phi}}(\underline{q},t) + \kappa c_0^{(1)} \underline{\Phi}^1(\underline{q},t) \right] \Big\} \tag{5.40}$$

mientras que el resto de los sumandos serán tratados como perturbaciones de $\Im_0$. No consideraremos a Ω (o su inversa) como parámetro perturbativo pues esto lleva a la aproximación semiclásica ya estudiada, sino que es simplemente una

constante. Vamos a estudiar la parte libre. Haciendo uso de las propiedades del apéndice A, así como de la forma del hamiltoniano (5.1) se tiene

$$c_0^{(1)} = {\mu_{ef}}^2 + \underline{q}^2 \equiv p\mu_1^2 + (1-p)\mu_1^2 + \underline{q}^2 \tag{5.41}$$

para cualquier forma de la función $D[\lambda]$.
Queremos calcular los propagadores libres, esto es, las correlaciones siguientes:

$$G_{20}^0(\underline{\Phi}(\underline{q},t),\underline{\Phi}'(\underline{q}',t')) = <\underline{\Phi}(\underline{q},t)\underline{\Phi}'(\underline{q}',t')> \tag{5.42}$$

$$G_{11}^0(\underline{\Phi}(\underline{q},t),\underline{\Psi}'(\underline{q}',t')) = <\underline{\Phi}(\underline{q},t)\underline{\Psi}'(\underline{q}',t')> \tag{5.43}$$

$$G_{02}^0(\underline{\Psi}(\underline{q},t),\underline{\Psi}'(\underline{q}',t')) = <\underline{\Psi}(\underline{q},t)\underline{\Psi}'(\underline{q}',t')> \tag{5.44}$$

o sus correspondientes transformadas de Fourier en el espacio de posiciones. Para ello consideramos el funcional generador de la teoría libre, escrito en espacio de momentos [11], e incluyendo fuentes para los dos tipos de campos,

$$Z_0[\underline{J},\underline{H}] = \int \mathcal{D}\underline{\Phi}(\underline{q},t)\mathcal{D}\underline{\Psi}(\underline{q},t)\exp(\Im_0)$$
$$\exp\Big\{\int_{R^d} d\underline{q}\int dt\underline{J}(\underline{q},t)\underline{\Phi}(\underline{q},t) + \underline{H}(\underline{q},t)\underline{\Phi}(\underline{q},t)\Big\} \tag{5.45}$$

Para hacer esta integración gaussiana, [176], se procede del siguiente modo:

1. Se introduce una transformación lineal de coordenadas de la forma:

$$\begin{aligned}\underline{\Psi}(\underline{q},t) &\longmapsto \underline{\Psi}(\underline{q},t) + A_1(\underline{q},t)\underline{J}(\underline{q},t) + A_2(\underline{q},t)\underline{H}(\underline{q},t)\\ \underline{\Phi}(\underline{q},t) &\longmapsto \underline{\Phi}(\underline{q},t) + B_1(\underline{q},t)\underline{J}(\underline{q},t) + B_2(\underline{q},t)\underline{H}(\underline{q},t).\end{aligned} \tag{5.46}$$

2. Se hace una transformación de Fourier para llevar la variable tiempo a su conjugada, frecuencia.
3. Se sustituye en (5.45) y se fijan las funciones A_i y B_i con $i = 1,2$, de tal modo que se anulen los coeficientes de todos los términos lineales en las fuentes $\underline{J}$ y $\underline{H}$. de este modo queda,

$$Z_0[\underline{J},\underline{H}] =$$
$$N\int \mathcal{D}\underline{\Phi}(\underline{q},w)\mathcal{D}\underline{\Psi}(\underline{q},w)\exp\Big\{\int_{R^d} d\underline{q}\int dw\Big[\underline{J}(\underline{q},t)G_{20}^0(\underline{\Phi}(\underline{q},w))\underline{J}(-\underline{q},-w)$$
$$+\underline{H}(\underline{q},t)G_{11}^0(\underline{\Phi}(\underline{q},w))\underline{J}(-\underline{q},-w) + \underline{H}(\underline{q},t)G_{02}^0(\underline{\Phi}(\underline{q},w))\underline{H}(-\underline{q},-w)\Big]\Big\} \tag{5.47}$$

donde en N se incluyen todos los términos sin fuentes.

[11] En lo que sigue, omitiremos siempre los factores 2π que aparecen al hacer las transformadas de Fourier a espacio de momentos y frecuencias, as como los asociados a funciones delta de Dirac.

4. Una vez que sólo se tienen formas cuadráticas en las fuentes, las correlaciones a dos cuerpos se obtienen trivialmente sin más que derivar el funcional generador respecto a las fuentes correspondientes, esto es,

$$\begin{aligned} G^0_{20}(\underline{\Phi}(\underline{q},w)) &= \frac{\kappa\Omega}{w^2+\kappa^2(\underline{q}^2+{\mu_{ef}}^2)^2} \\ G^0_{11}(\underline{\Phi}(\underline{q},w)) &= \frac{1}{iw+\kappa(\underline{q}^2+{\mu_{ef}}^2)} \\ G^0_{02}(\underline{\Phi}(\underline{q},w)) &= 0 \end{aligned} \tag{5.48}$$

son los propagadores en espacio de momentos-frecuencias.

5. Hacer la transformada inversa de Fourier para obtener los propagadores dependientes del tiempo. Sin más que integrar el el plano complejo, utilizando el teorema de los residuos se obtiene,

$$\begin{aligned} G^0_{11}(\underline{\Phi}(\underline{q},t-t')) &= \Theta(t-t')\exp\left[-\kappa(\underline{q}^2+\mu^2_{eff})(t-t')\right] \\ G^0_{20}(\underline{\Phi}(\underline{q},t-t')) &= \frac{\Omega}{2(\underline{q}^2+\mu^2_{eff})}\left[G^0_{11}(\underline{\Phi}(\underline{q},t-t'))+G^0_{11}(\underline{\Phi}(\underline{q},t'-t))\right] \\ &= \frac{\Omega}{2(\underline{q}^2+\mu^2_{eff})}\Big[\Theta(t-t')\exp\left[-\kappa(\underline{q}^2+\mu^2_{eff})(t-t')\right]+ \\ &+ \Theta(t'-t)\exp\left[-\kappa(\underline{q}^2+\mu^2_{eff})(t'-t)\right]\Big] \end{aligned} \tag{5.49}$$

Nótese que el primero de estos dos propagadores es *irreversible*; esto es, sólo es no nulo para tiempos $t-t'>0$. Esta propiedad es otra forma de expresar la causalidad de las funciones respuesta.

5.4.2 Reglas de Feynman.

Para introducir la teoría perturbativa, como es usual, se consideran los términos del desarrollo en series de potencias (5.38), no incluidos la parte libre, (5.40), y se hace uso de la conocida propiedad que relaciona promedios de los campos con derivadas respuesto a las fuentes correspondientes, evaluadas en valores nulos de las fuentes, esto es,

$$\begin{aligned} G_{MN} &= <\underline{\Psi}_1(\underline{q}_1,t'_1)...\underline{\Psi}_M(\underline{q}_M,t'_M)\underline{\Phi}_1(\underline{q}_1,t_1)...\underline{\Phi}_1(\underline{q}_N,t_N)> \\ &= \frac{\delta^{M+N}Z[\underline{J},\underline{H}]}{\delta\underline{H}_1(\underline{q}_1,t'_1)...\delta\underline{H}_M(\underline{q}_M,t'_M)\delta\underline{J}_1(\underline{q}_1,t_1)...\delta\underline{J}_N(\underline{q}_1,t_N)}\Bigg|_{\underline{J},\underline{H}=\underline{0}} \end{aligned} \tag{5.50}$$

con la normalización, $Z[\underline{0},\underline{0}]=1$. Esta propiedad se usa, para calcular correlaciones, y sustituyendo Z por Z_0 para expresar los términos perturbativos del

lagrangiano como derivadas.
Haciendo las identificaciones usuales en teoría de campos se obtienen las siguientes reglas de Feynman para la evaluación de los términos perturbativos en términos de diagramas [12].
Elementos.

1. Hay dos tipos de propagadores dados por (5.49) y que representamos como

$$G^0_{20}(\underline{\Phi}(\underline{q}, t-t')) \equiv \quad \underset{t \qquad t'}{\text{———}} \tag{5.51}$$

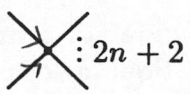
y llamamos reversible, y

$$G^0_{11}(\underline{\Phi}(\underline{q}, t-t')) \equiv \quad \underset{t \qquad t'}{\text{———}\!\!\rightarrow} \tag{5.52}$$

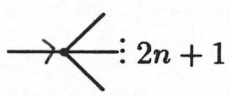
al que llamamos irreversible.

2. Existe un conjunto infinito numerable de tipos de vértices, de tres tipos diferentes:

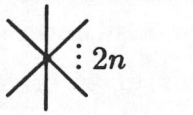
   - Con dos patas irreversibles:



     que provienen del sumando proporcional a $\underline{\Psi}^2$ en (5.18), y tienen asociado un factor $c_2^{(2n+2)}$.
   - Con una pata irreversible:



     que provienen del sumando proporcianal a $\underline{\Psi}$ en (5.18), y tienen asociado un factor $c_0^{(2n+1)}$.
   - Sin patas irreversibles:



     y tienen asociado un factor $(1/2)(2n+1)c_0^{(2n+1)}$, si provienen del primero de los términos con derivadas en (5.18), ó $-(1/4)(2n+2)(2n+1)c_2^{(2n+2)}$, si provienen del segundo.

[12] Damos a continuación, las reglas de Feynman en espacio de momentos y tiempos. Del mismo modo, se pueden considerar también en espacio posiciones y/o frecuencias.

Reglas de Feynman para las correlaciones.

1. Construir diagramas utilizando los elementos anteriores. Para una función de correlación G_{NM}, se consideran M patas externas irreversibles, con la flecha en sentido saliente, y un total de N propagadores, unos de ellos reversibles y el resto irreversibles con la flecha en sentido entrante.
2. Etiquetarlos del siguiente modo:.
   - En cada propagador un momento, q.
   - En cada propagador sus tiempos asociados, t y t'.
   - En cada vértice una variable tiempo, t.
   - En cada vértice una delta de Dirac para los momentos entrantes.
3. Multiplicar cada vértice por el factor dado en su definición.
4. Incluir un factor G^0_{20}, y uno G^0_{11}(por cada pata reversible e irreversible respectivamente, con los momentos y tiempos correspondientes).
5. Integrar sobre todos los tiempos y momentos internos, esto es, los asociados a algún vértice.
6. Incluir para cada diagrama un factor combinatorial que de cuenta del número de formas en que se puede etiquetar el mismo.
7. Incluir en cada diagrama un factor $\prod_{i=1}^{\infty}(1/n_i!)$ donde i corre sobre todos los posibles vértices y n_i es el número de vértices del tipo i.
8. Sumar todos los diagramas para cada tipo de correlación.

Observaciones.

1. Diagramas que incluyan bucles del tipo

   dan siempre una contribución nula. En efecto, aparecen dos funciones escalón con argumentos iguales y de signo opuesto, e integradas en dicho argumento, esto es, $\int dt\Theta(t)\Theta(-t)f(t) = 0$, siendo $f(t)$ una función genérica.
2. El valor de la función escalón en el origen es 1/2. En efecto, discretizando la ecuación de Langevin asociada, como se hizo en el capítulo 4, es directo verificar que tal y como definimos la función escalón su valor en el origen es $\Theta(0) = 1-\alpha$, y en la prescripción de Stratonovich que estamos considerando, $\Theta(0) = 1/2$.
3. Propiedad.
   Aquellos diagramas en los que todas las patas irreversibles de un mismo

vértice estén contraidas a otras patas reversibles de ese mismo vértice, se cancelan exactamente con un diagrama análogo, en el que el vértice en cuestión se sustituye por otro, proviniente de un término con derivadas (procedente del jacobiano), del tipo c_0, si sólo hay un autobucle irreversible, y del tipo c_2, si hay dos.
En la demostración de esta propiedad, que dejamos como ejercicio, se hace uso de que $\Theta(0) = 1/2$ [13].
De este modo, en los desarrollos diagramáticos podemos omitir los diagramas en los que todas las patas irreversibles de alguno de los vértices formen autobucles, y todos los diagramas con vértices sin patas irreversibles, pues la suma de sus contribuciones a todas las correlaciones es nula.
Nótese que esta propiedad no involucra a vértices con dos patas irreversibles y un solo autobucles irreversible.

4. Los diagramas sin patas externas cancelan con la normalización en (5.50), por lo que no han de ser considerados para calcular las correlaciones.

Reglas de Feynman para los cumulantes.
Si en lugar de calcular las correlaciones (momentos del funcional generador) nos limitamos a calcular los cumulantes asociados, que contienen toda la información del sistema y notamos W_{NM}, entonces, diagramáticamente se eliminan los diagramas disconexos [6, 176, 100], y el resto de las reglas queda como en el caso anterior.
Reglas de Feynman para las funciones vértice. Consideremos el funcional generador asociado a la transformada de Legendre de $\log Z[\underline{J}, \underline{H}]$ respecto a todas sus fuentes, esto es,

$$\Gamma(\overline{\underline{\Phi}}, \overline{\underline{\Psi}}) \equiv -\log Z[\underline{J}, \underline{H}] + \int_{R^d} d\underline{r} \int dt \ \left[\overline{\underline{\Phi}}(\underline{r}, t)\underline{J}(\underline{r}, t) + \overline{\underline{\Psi}}(\underline{r}, t)\underline{H}(\underline{r}, t)\right] \tag{5.53}$$

con

$$\overline{\underline{\Phi}}(\underline{r}, t) = \frac{\delta \log Z[\underline{J}, \underline{H}]}{\delta \underline{J}(\underline{r}, t)}, \qquad \overline{\underline{\Psi}}(\underline{r}, t) = \frac{\delta \log Z[\underline{J}, \underline{H}]}{\delta \underline{H}(\underline{r}, t)}. \tag{5.54}$$

Se define,

$$\Gamma_{MN}(\underline{q}'_1, t'_1, ..., \underline{q}'_M, t'_M, \underline{q}_1, t_1, ..., \underline{q}_N, t_N) = \frac{\delta^{M+N}\Gamma[\overline{\underline{\Phi}}, \overline{\underline{\Psi}}]}{\delta\overline{\underline{\Psi}}_1(\underline{q}_1, t'_1)...\delta\overline{\underline{\Psi}}_M(\underline{q}_M, t'_M)\delta\overline{\underline{\Phi}}_1(\underline{q}_1, t_1)...\delta\overline{\underline{\Phi}}_N(\underline{q}_1, t_N)}\Bigg|_{\underline{J},\underline{H}=\underline{0}}. \tag{5.55}$$

Haciendo uso de (5.54), es sencillo demostrar [6] la siguiente propiedad, en espacio de frecuencias

$$\hat{\Gamma}(\underline{q}, w) = \hat{G}^{-1}(\underline{q}, w) \tag{5.56}$$

[13] Si hubiesemos elegido otro convenio, esta cancelación se hubiese producido igualmente. Para comprobarlo basta considerar el lagrangiano dependiente del parámetro α, y $\Theta(0) = 1 - \alpha$.

donde los elementos de $\hat{G}$ son las correlaciones a dos cuerpos, y los de $\hat{\Gamma}$ las funciones vértice a dos cuerpos. Así, se tiene, para la parte libre del funcional generador

$$\Gamma^0_{02}(\underline{q}, w) = \frac{G^0_{20}(\underline{q}, t)}{|G^0_{11}|^2} = -2\kappa\Omega \tag{5.57}$$

$$\Gamma^0_{11}(\underline{q}, w) = \frac{G^0_{11}(\underline{q}, t)}{|G^0_{11}|^2} = -iw + \kappa({\mu_{ef}}^2 + \underline{q}^2) \tag{5.58}$$

y

$$\Gamma^0_{20}(\underline{q}, w) = 0. \tag{5.59}$$

Volviendo a hacer uso de (5.54), tomando derivadas convenientemente, se demuestra, que las reglas de Feynman para obtener las contribuciones no libres a las funciones vértice son las mismas que en el caso anterior salvo por las siguientes diferencias:

1. Aparece un signo menos adicional en cada diagrama.
2. No aparecen diagramas tales que si se les amputara una pata interna dejarán de ser conexos, se suele decir que sólo aparecen *diagramas irreducibles.*
3. No se escriben los propagadores para las patas externas: estas son amputadas.

Es importante notar que dada una función vértice, Γ_{NM}, ésta no se corresponde de forma unívoca con un cumulante, $W_{N'M'}$, sino que en función de las patas externas que se a nadan puede generar diferentes correlaciones. De hecho la relación general entre funciones vértice y propagadores es una relación matricial.

5.4.3 Límite de equilibrio.

En cualquiera de los límites de equilibrio, p=0,1, la solución estacionaria de el modelo es conocida. Debido a que en dichos límites se cumple la propiedad de balance detallado, la solución estacionaria asociada viene dada por la medida de Gibbs correspondiente con el hamiltoniano (5.1). Las correlaciones asociadas a dicha solución son bien conocidas, ya que son las asociadas al modelo estático Φ^4, y éste se toma como ejemplo típico en la mayoría de los manuales para estudiar desarrollos perturbativos [14]. De este modo, vamos a obtener dichas correlaciones estacionarias de equillibrio a partir de nuestro funcional dinámico, comprobando que coinciden con las obtenidas en la teoría estática. Esto nos servirá como test para funcional generador.
Comenzamos considerando el caso más sencillo $\lambda = 0$, para el que conocemos las correlaciones estacionarias de forma exacta. En particular, las correlaciones a dos

[14] Véase, por ejemplo [6, 176, 81, 111].

cuerpos vienen dadas por los propagadores de la teoría estática, $G^0_{est} = \Omega(\mu^2 + \underline{q}^2)$ [15]. y las correlaciones a más cuerpos son nulas.
Dado que tenemos una infinidad de vértices, comenzamos considerando los más sencillos: aquellos con 4 ó menos patas.
Los diagramas de Feynman que contribuyen se representan en las figuras (5.4.3) (diagramas con un bucle) y (5.2) (diagramas con dos bucles).
Hemos excluido los diagramas con autobucles irreversibles que cancelan con

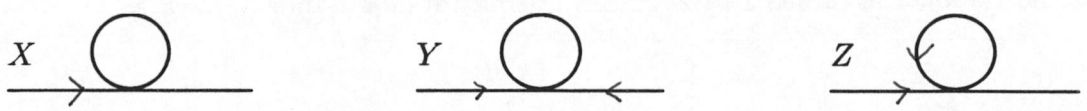


Figura 5.1: Diagramas de Feynman para correlaciones estaticas a dos cuerpos con un bucle y con vértices de cuatro patas.

términos con derivadas. Sin embargo, si incluimos diagramas reducibles, pues vamos a calcular correlaciones conexas y no funciones vértice.
Llamamos $I_{A,B,...}$ a la expresión análitica de cada uno de los diagramas. Nótese que debido al relación que existe en el equilibrio entre los coeficientes Ξ_0 y Ξ_2, se puede escribir $c^{n+1}_{(0)} = c^n_{(2)}(\mu^2 + \underline{q}^2)$. De este modo expresamos todos los coeficientes de los vértices en función las constantes c^n_0. En particular, usaremos

$$c^{(3)}_0(\underline{q}_1, \underline{q}_2, \underline{q}_3) = \frac{d_3 \kappa \gamma^2}{3} \prod_{i=1}^{3} (q_i^2 + \mu^2) \tag{5.60}$$

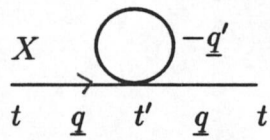
y

$$c^{(5)}_0(\underline{q}_1, \underline{q}_2, \underline{q}_3, \underline{q}_4, \underline{q}_5) = \frac{d_5 \kappa \gamma^2}{60} \prod_{i=1}^{5} (q_i^2 + \mu^2) \tag{5.61}$$

donde $d_i = D^{(i)}[0]$ (véase apéndice A), y $\underline{q}_i$ son los momentos de las patas reversibles conectadas al vértice en cuestión.

Diagramas con un bucle.

Comencemos calculando el diagrama X de la figura (5.4.3), que etiquetamos como sigue,



$$I_X(\underline{q}) = 6 d_3 \kappa \gamma^2 \Omega^2 \int_{R^d} d\underline{q}' \int dt \frac{1}{(q'^2 + \mu^2)} \frac{1}{(q^2 + \mu^2)}$$

[15] En la teoría de equilibrio μ^2 representa a μ_1^2 o μ_2^2 según sea $p = 1$ ó $p = 0$, respectivamente.

$$\left[\Theta(t-t')\exp(-\kappa(q^2+\mu^2)(t-t')\right]^2 (q'^2+\mu^2)^2(q^2+\mu^2)$$
$$= d_3\gamma^2\Omega^2\frac{1}{(q^2+\mu^2)}\int_{R^d} d\underline{q}'(q'^2+\mu^2) \tag{5.62}$$

y no depende de t, como era de esperar. El factor combinatorial, 6, corresponde a que cada externa se puede contraer con una pata de un vértice reversible o una irreversible (factor 2), la reversible se elige entre un conjunto de tres (factor 3), mientras que la irreversible se une de forma unívoca.
El cálculo de los diagramas Y e Z con la misma topología que X lleva a:

$$I_Y(\underline{q}) = -\frac{I_X(\underline{q})}{3} \tag{5.63}$$

$$I_Z(\underline{q}) = -\frac{2\ I_X(\underline{q})}{3} \tag{5.64}$$

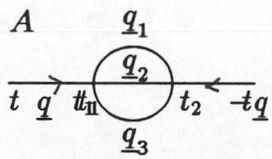
Por lo que

$$I_X(\underline{q}) + I_Y(\underline{q}) + I_Z(\underline{q}) = 0 \tag{5.65}$$

y la contribución total es nula.

Diagramas con dos bucles.
Separamos el conjunto de diagramas de la figura (5.2) en 5 bloques:

1. Diagramas A, B, C y D.
   Diagrama A:



$$I_A(\underline{q}) = 12\left(\tfrac{1}{3}d_3\kappa\gamma^2\right)^2\frac{1}{2}\int dt_1\int dt_2\int_{R^d} d\underline{q}_1\int_{R^d} d\underline{q}_2\int_{R^d} d\underline{q}_3$$
$$\delta(\underline{q}+\underline{q}_1+\underline{q}_2+\underline{q}_3)\Big\{\prod_{i=1}^{3}\frac{1}{(q_i^2+\mu^2)}$$
$$\Theta(t-t_1)\exp(-\kappa(q^2+\mu^2)(t-t_1))\Theta(t-t_2)\exp(-\kappa(q^2+\mu^2)(t-t_2))$$
$$\left[\Theta(t_1-t_2)\exp(-\kappa(q_1^2+q_2^2+q_3^2+3\mu^2)(t_1-t_2))\right.$$
$$\left.+\Theta(t_2-t_1)\exp(-\kappa(q_1^2+q_2^2+q_3^2+3\mu^2)(t_2-t_1))\right]$$
$$\Omega^3\textstyle\prod_{i=1}^{3}(q_i^2+\mu^2)^2\Big\}$$
$$= 6\left(\tfrac{1}{3}d_3\gamma^2\right)^2\Omega^3\int_{R^d} d\underline{q}_1\int_{R^d} d\underline{q}_2\prod_{i=1}^{3}(q_i^2+\mu^2)$$
$$\frac{1}{(\underline{q}^2+\mu^2)}\frac{1}{(\underline{q}_1^2+\underline{q}_2^2+\underline{q}^2+(\underline{q}_1+\underline{q}_2+\underline{q})^2)+4\mu^2}. \tag{5.66}$$

Para los restantes se obtiene:

$$I_B = 3I_A, \qquad I_C = -2I_A, \qquad I_D = -2I_A \tag{5.67}$$

y

$$I_A + I_B + I_C + I_D = 0. \tag{5.68}$$

2. Diagramas E, F, y G.
   No explicitamos ninguna de las integrales; la relación entre ellas es:

$$I_E + I_F + I_G = I_E \left(1 - \frac{2}{3} - \frac{1}{3}\right) = 0, \tag{5.69}$$

   y se cancelan.

3. Diagramas H, I, y J.
   La relación entre integrales es:

$$I_H + I_I + I_J = I_H \left(1 - \frac{2}{3} - \frac{1}{3}\right) = 0 \tag{5.70}$$

   que se cancelan.

4. Diagramas K, L, M, N, O, P, Q, R, y S.
   No explicitamos ninguna de las integrales; la relación entre ellas es:

$$\begin{aligned} &I_K + I_L + I_M + I_N + I_O + I_P + I_Q + I_R + I_S = \\ &I_K \left(1 + 1 + \frac{4}{9} + \frac{4}{9} + \frac{4}{9} - \frac{2}{3} - \frac{2}{3} - \frac{4}{3} - \frac{2}{3}\right) = 0 \end{aligned} \tag{5.71}$$

   con lo que este bloque también se anula.

5. Diagramas T, U y V. La relación entre integrales :

$$I_T + I_U + I_V = I_T \left(1 + \frac{1}{4} - \frac{5}{4}\right) = 0. \tag{5.72}$$

Vemos, que todos los diagramas considerados se anulan, por lo que lo única contribución resultante es la del propagador libre evaluado a tiempos iguales, que coincide exactamente con el propagador de la teoría estática. De este modo, en los órdenes calculados, el límite de tiempos externos iguales de nuestra teoría en el equilibrio, reproduce los resultados deducidos a partir del la teoría independiente del tiempo. La extensión de este resultado para incluir correlaciones a más cuerpos, $\lambda \neq 0$ y vértices con mayor número de patas puede hacerse sin demasiada dificultad para cualquier caso particular. Sin embargo, encontrar un algoritmo general para probar la implicación anterior perturbativamente requiere un complejo cómputo de combinaciones, nada trivial, que dejamos como ejercicio

propuesto.
En definitiva, nuestro modelo dinámico reproduce correctamente las correlaciones estáticas derivadas a partir del formalismo de equilibrio. Por otro lado, es evidente, que el comportamiento dinámico del sistema, sí que depende de forma esencial de los parámetros de la dinámica, d_i, y para tiempos externos diferentes las correlaciones varían con el mecanismo dinámico considerado.

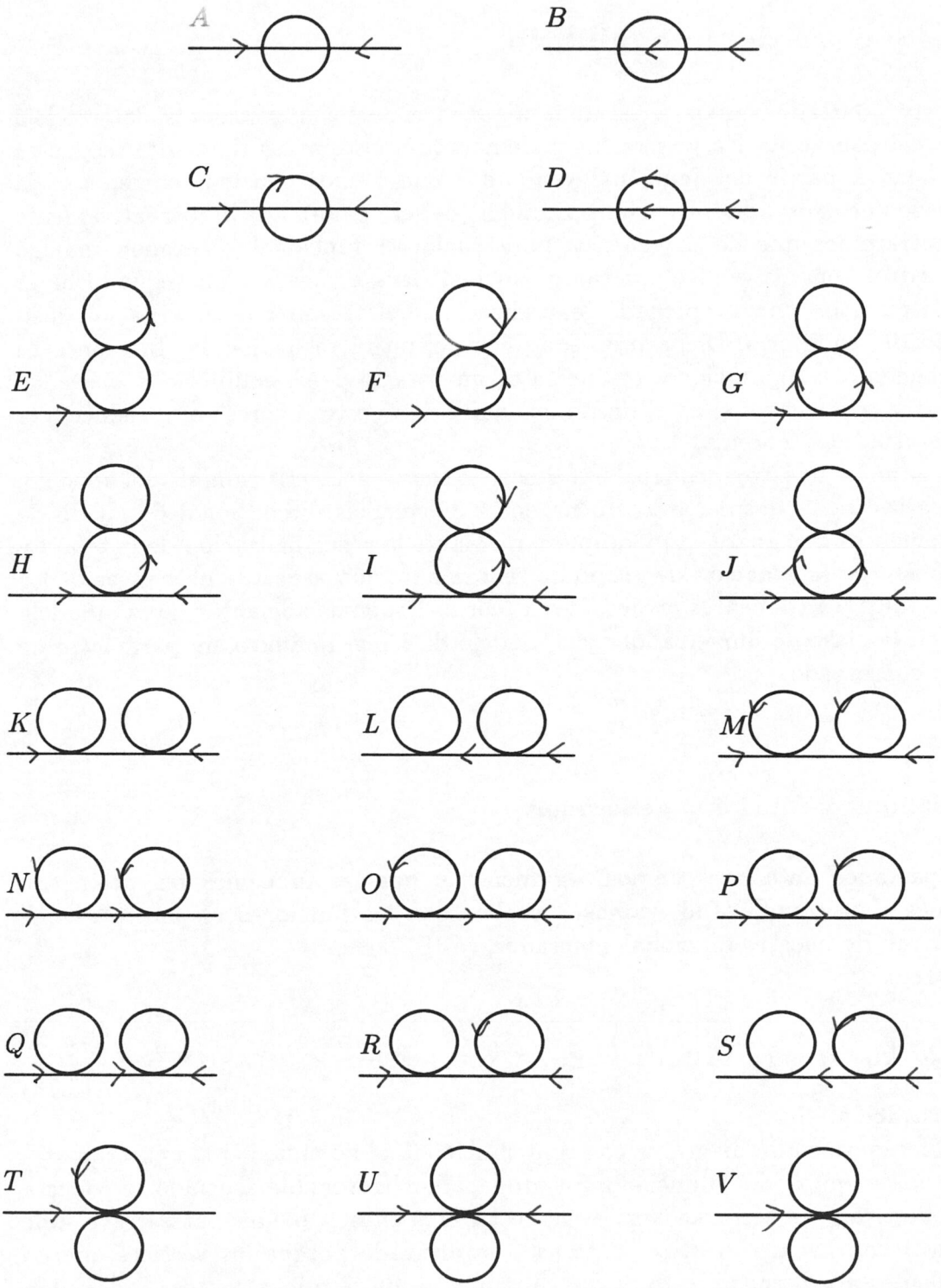


Figura 5.2: Diagramas de Feynman para correlaciones estáticas a dos cuerpos con dos bucles y con vértices de cuatro y seis patas.

5.4.4 Caso de no equilibrio.

En este apartado vamos a estudiar algunos aspectos particulares del modelo fuera del equilibrio. En primer lugar demostraremos que las funciones respuesta derivadas a partir del funcional generador que hemos construido respetan la condición de causalidad. Dicha propiedad ha de ser demostrada perturbativamente y mostraremos que no es genérica para cualquier funcional generador análogo al nuestro, constituyendo, por tanto, un test para el mismo. En segundo lugar demostraremos una propiedad, generalización del teorema de fluctuación disipación del equilibrio. Dicha propiedad nos permitirá relacionar las funciones de correlación con las funciones respuesta en un sistema de no equilibrio y viceversa. Además, veremos como en el límite de equilibrio nuestra expresión se reduce a la forma usual del teorema.
No obstante, nuestro principal interés se centra en la criticalidad del modelo. Para estudiar la misma, primero haremos un análisis dimensional detallado de los elementos que aparecen, y despues, mediante la renormalización de la teoría y resolución de la ecuación de grupo de renormalización asociada obtendremos los puntos fijos y exponentes críticos de la teoría. Podemos adelantar que el modelo yace en la clase de universalidad del modelo de Ising dinámico sin parámetro de orden conservado.

Causalidad y funcional generador.

En apartados anteriores hemos argumentado que las funciones respuesta son causales. Por completitud, vamos a probar que las funciones respuesta es que se derivan de nuestro funcional generador, (5.18), lo son.
Propiedad:

$$W_{NM}(\underline{q}_1, t_1, ..., \underline{q}_N, t_N, \underline{q}'_1, t'_1, ..., \underline{q}'_M) = 0, \qquad si\ \exists\ t'_j > t_i\ \forall i \in \{1, 2, ..., N\}. \tag{5.73}$$

Demostración:
Consideremos, en un diagrama con contribución final no nula, la pata externa asociada al tiempo t_j del enunciado. Su propagador irreversible asociado se conecta a un vértice, y éste, a su vez, se conecta al menos a o una pata irreversible con la flecha hacia el vértice. Esto está garantizado porque los vértices que no cumplen esta propiedad, esto es, los provinientes de términos con derivadas, dan una contribución final nula al cancelarse exactamente con diagramas que incluyen autobucles irreversibles. Siguiendo esta nueva pata se llega a otro vértice, y podemos iterar el razonamiento anterior. Pueden darse dos posibilidades:

1. Que se vuelva a pasar por un mismo vértice por segunda vez. En este caso se tiene un producto de funciones escalón de la forma:

$$\Theta(\tau_1 - \tau_2)\Theta(\tau_2 - \tau_3)...\Theta(\tau_m - \tau_1) = 0 \tag{5.74}$$

siendo τ_i, $i = 1, 2..., m$ los tiempos de cada uno de los vértices considerados. Así, en este caso el diagrama se anula.

2. Que se llegue a una pata externa con tiempo t_i lo cual va contra la hipótesis.

De este modo, la única posibilidad compatible con la condición $t'_j > t_i \forall i \in \{1, 2, ..., N\}$ es que el diagrama sea nulo, quedando demostrada la propiedad.†
Del mismo modo se puede probar una propiedad análoga a ésta, para funciones vértice:

$$\Gamma_{NM}(\underline{q}_1, t_1, ..., \underline{q}_N, t_N, \underline{q}'_1, t'_1, ..., \underline{q}'_M) = 0 \qquad si\ \exists\ t_j > t'_i\ \forall i \in \{1, 2, ..., N\}. \tag{5.75}$$

Queremos resaltar el hecho de que si, en lugar de considerar la representación de la ecuación de Fokker-Planck en términos de integrales de camino que hemos obtenido en el capítulo 4, hubiésemos considerado alguna de las que se utilizan en la bibbliografía (véase, por ejemplo, [176, 25]) aparecerían vértices adicionales sin patas irreversibles, que conducen a funciones respuesta no causales. En particular, para la representación de [176, capítulo 4] se obtiene un sumando adicional proporcional a $\frac{\delta \Xi_2}{\delta \underline{\Phi}} \frac{\delta \log \Xi_2}{\delta \underline{\Phi}}$, y sin campos respuesta, que viola la condición de causalidad. Esto reafirma nuestra confianza en la solución de integrales de camino considerada frente a otras alternativas construidas de forma más "naive".

Relaciones de fluctuación disipación generalizadas.

La idea subyacente bajo el teorema de fluctuación disipación en el equilibrio es que las fluctuaciones en el estado estacionario de un sistema dado pueden relacionarse con la forma en que se relaja hacia dicho estado. Las fluctuaciones pueden calcularse aplicando un campo externo débil: el sistema responde absorbiendo energía de una forma que depende del espectro de fluctuaciones en el equilibrio. El teorema de fluctuación disipación establece cómo el espectro de fluctuaciones, o el proceso de absorción de energía se relacionan con las correlaciones del sistema [145].
Vamos a analizar en nuestros modelos de no equilibrio la relación entre correlaciones y funciones respuesta.
Para ello consideramos una fuente externa adicional que incluimos en la ecuación de Fokker-Planck (o en su ecuación de Langevin equivalente) y calculamos las dos acciones asociadas: en términos sólo de campos $\underline{\Phi}$, (5.13), o en términos de $\underline{\Phi}$ y $\underline{\Psi}$, (5.18). Calculamos la derivada respecto al campo adicional en los dos

funcionales generadores, (5.12) y (5.17), e igualamos los resultados. Veamos los cálculos explícitos:
Añadir un campo externo $\kappa\underline{B}(\underline{r},t)$ equivale a hacer la sustitución $\Xi_0 \mapsto \Xi_0 - \kappa\underline{B}$. Llevando ésto a (5.13) y despreciando infinitésimos de orden $\underline{B}^2$, queda un sólo sumando adicional respecto a la acción sin fuente, esto es,

$$\mathcal{L} \mapsto \mathcal{L} + \frac{1}{2}\int_{R^d} d\underline{r} \int dt \left[\dot{\underline{\Phi}}(\underline{r},t) + \Xi_0(\underline{\Phi}(\underline{r},t))\right] \frac{\kappa\underline{B}(\underline{r},t)}{\Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r},t))}. \tag{5.76}$$

Haciendo lo mismo en (5.18) se obtiene como término adicional:

$$\Im \mapsto \Im + \int_{R^d} d\underline{r} \int dt \left[\underline{\Psi}(\underline{r},t)\kappa\underline{B}(\underline{r},t)\right]. \tag{5.77}$$

Derivando los funcionales generadores, modificados, respecto a cada una de los dos tipos de fuentes, $\underline{J}(\underline{r},t)$ y $\underline{B}(\underline{r}',t')$, se obtiene:

$$\frac{1}{2}\left\langle \underline{\Phi}(\underline{r},t)\left[\frac{\dot{\underline{\Phi}}(\underline{r}',t') + \Xi_0(\underline{\Phi}(\underline{r}',t'))}{\Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r}',t'))}\right]\right\rangle = < \kappa\underline{\Phi}(\underline{r},t)\underline{\Psi}(\underline{r}',t') > \tag{5.78}$$

donde $< \ldots >$ indica promedio en las integrales funcionales [16]. Utilizando que, como hemos demostrado, la función respuesta se anula si $t > t'$, y la propiedad de invariancia ante inversión temporal de la acción dada por (5.13) es directo mostrar que (5.78) puede escribirse como [9]:

$$\Theta(t-t')\left\langle \underline{\Phi}(\underline{r},t)\frac{\dot{\underline{\Phi}}(\underline{r}',t')}{\Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r}',t'))}\right\rangle = < \kappa\underline{\Phi}(\underline{r},t)\underline{\Psi}(\underline{r}',t') > \tag{5.79}$$

que da la relación entre correlaciones y funciones respuesta en nuestro sistema. Una forma alternativa de proceder, útil para aislar las correlaciones a dos cuerpos, consiste en considerar una fuente de la forma: $\kappa\Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r},t))\underline{B}(\underline{r},t)$, en lugar de $\kappa\underline{B}(\underline{r},t)$. Repitiendo el desarrollo anterior se obtiene:

$$\Theta(t-t') < \underline{\Phi}(\underline{r},t)\dot{\underline{\Phi}}(\underline{r}',t') > = \left\langle \kappa\underline{\Phi}(\underline{r},t)\left[\underline{\Psi}(\underline{r}',t')\Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r}',t')) - \frac{1}{2}\frac{\delta\Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r}',t'))}{\delta\underline{\Phi}(\underline{r}',t')}\right]\right\rangle, \tag{5.80}$$

definiendo $\tau = t - t'$, haciendo su transformada de Fourier al espacio de frecuencuencias y evaluándola a frecuencia nula, queda:

$$< \underline{\Phi}(\underline{r},w=0)\underline{\Phi}(\underline{r}',w=0) >$$
$$\left\langle \kappa\underline{\Phi}(\underline{r},-w)\left[\underline{\Psi}(\underline{r}',w)\Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r}',w)) - \frac{1}{2}\frac{\delta\Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r}',w))}{\delta\underline{\Phi}(\underline{r}',w)}\right]\right\rangle_{w=0}. \tag{5.81}$$

[16] Puesto que estamos considerando correlaciones y no cumulantes, diagramaticamente estas relaciones incluyen diagramas tanto conexos como inconexos. Es posible, no obstante, reescribir perturbativamente tanto esta relación como las siguientes para considerar sólo diagramas conexos.

Y esta es la expresión final de nuestro teorema para correlaciones a dos cuerpos. Nótese que en el límite de equilibrio de Bausch-Janssen-Wagner, esta expresión se reduce, como caso particular, al teorema de fluctuación disipación en el equilibrio enunciado por dichos autores [9]. La expresión anterior puede ser generalizada de forma directa sin más que sustituir $\underline{\Phi}(\underline{r},t)$ por un operador más complicado de los campos: $Op(\underline{\Phi}(\underline{r},t))$, obteniéndose,

$$\begin{aligned} &< Op(\underline{\Phi}(\underline{r},0))\underline{\Phi}(\underline{r}',0) > \\ &= \left\langle \kappa Op(\underline{\Phi}(\underline{r},-w)) \left[\underline{\Psi}(\underline{r}',w)\Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r}',w)) - \frac{1}{2}\frac{\delta\Xi_2(\underline{\Phi}(\underline{r}',w))}{\delta\underline{\Phi}(\underline{r}',w)} \right] \right\rangle_{w=0} \end{aligned} \tag{5.82}$$

que es la expresión más general del teorema.
Es posible también haciendo transformaciones de Legendre obtener una relación análoga a la anterior para funciones vértice en lugar de correlaciones. Este tipo de relaciones son útiles para simplificar cálculos pues el número de promedios independientes se reduce. En particular, estas expresiones se utilizan para relacionar el exponente crítico dinámico con los estáticos [17].

Contaje dimensional.

En esta sección y las siguientes vamos a estudiar el comportamiento crítico de nuestro modelo. Para ello es necesario estudiar las divergencias que aparecen en las integrales asociadas al cómputo de diagramas de Feynman. Es bien conocido que el análisis dimensional de los distintos términos que aparecen en la acción es de gran ayuda para determinar dónde aparecen las divergencias, así como la relevancia e irrelevancia de operadores [6, 176, 13, 100, 111].
Consideramos como dimensiones fundamentales las de el parámetro κ, $[\kappa]$, y de la inversa de la longitud, que notaremos $[\Lambda]$. Su relación con las dimensiones espacial y temporal es $[\kappa] = [L]^2[T]^{-1}$ y $[\Lambda] = [L]^{-1}$, respectivamente. De la condición de adimensionalidad de la acción se derivan las siguientes relaciones.

$$\begin{array}{llll} [\underline{\Phi}(\underline{r},t)] = [\Lambda]^{\frac{d}{2}-1}, & [\underline{\Psi}(\underline{r},t)] = [\Lambda]^{\frac{d}{2}+1} \\ [\underline{\Phi}(\underline{r},w)] = [\kappa]\,[\Lambda]^{\frac{d}{2}-3}, & [\underline{\Psi}(\underline{r},w)] = [\kappa]\,[\Lambda]^{\frac{d}{2}-1} \\ \left[\underline{\Phi}(\underline{q},t)\right] = [\Lambda]^{-\frac{d}{2}-1}, & \left[\underline{\Psi}(\underline{q},t)\right] = [\Lambda]^{-\frac{d}{2}+1} \\ \left[\underline{\Phi}(\underline{q},w)\right] = [\kappa]^{-1}\,[\Lambda]^{-\frac{d}{2}-3}, & [\underline{\Phi}(\underline{r},t)] = [\kappa]^{-1}\,[\Lambda]^{-\frac{d}{2}-1}. \end{array}$$

Del mismo modo se calculan las dimensiones de las correlaciones y funciones vértice utilizando las expresiones de las mismas como derivadas de sus respectivos

[17] Relaciones similares a las que aquí hemos obtenido, pueden obtenerse en una formulación supersimétrica de la ecuación de Fokker-Planck o Langevin de partida [175]. De hecho, es posible abordar todo el problema de la renormalización de ecuaciones dinámicas estocásticas en un formalismo supersimétrico [176, 172, 139].

funcionales generadores. En particular, para estas últimas se tiene:

$$\left[\Gamma_{NM}(\underline{q}_1, w_1, ...\underline{q}'_M w'_M)\right] = [\kappa]\,[\Lambda]^{d_{NM}} \tag{5.83}$$

con

$$d_{NM} \equiv -\frac{d}{2}(N+M-2) + (N-M+2). \tag{5.84}$$

Por otro lado, caracterizando cada vértice con los parámetros a, b y c, siendo:

- a - número de "patas" reversibles de el vértice.
- b - número de "patas" irreversibles de vértice.
- c - número de factores $\underline{q}^2$ en la constante de un vértice,

y llamando C_{abc} a su constante de acoplamiento se tiene

$$[C_{abc}] = [\kappa][\Lambda]^{\delta_{abc}} \equiv [\kappa][\Lambda]^{(d-\frac{a}{2}-\frac{b}{2})+2+a-b-2c}. \tag{5.85}$$

Algunos de los diagramas de Feynman que podemos construir mediante las reglas obtenidas anteriormente presentan divergencias infrarrojas, esto es, singularidades para valores nulos del momento, en el límite en que $\mu_{ef} \to 0$ y dependiendo de la dimensión espacial que se considere. Una forma conveniente de analizar el problema de las singularidades infrarrojas de la teoría consiste en reescalar las variables de espacio y tiempo (momentos, frecuencias) de tal manera que sean medidas en términos de la longitud de correlación, que, como es bien sabido, diverge en las vecindades del punto crítico [176]. Para ello hacemos la sustitución $\underline{r} \to \Lambda\underline{r}$ manteniendo κ constante, y ,por consistencia dimensional, $t \to \tau\Lambda^2$. Haciendo este reescalamiento en la acción (5.18), se tiene:

$$\begin{aligned} \underline{\Phi} &\to \underline{\Phi}\Lambda^{-\frac{(d-2)}{2}} \\ \underline{\Psi} &\to \underline{\Psi}\Lambda^{-\frac{(d+2)}{2}} \end{aligned} \tag{5.86}$$

y podemos definir unas nuevas constantes de acoplamiento:

$$C_{abc} \to C_{abc}\Lambda^{d_{abc}} \tag{5.87}$$

consistentemente con el contaje dimensional. En términos de esta nueva escala Λ el dominio crítico queda caracterizado por:

$$\begin{gathered} \mu_{eff}^2\Lambda^2 << \Lambda^2 \\ distancias\ (\underline{r}) >> \frac{1}{\Lambda};\ momentos(\underline{q}) << \Lambda \\ tiempos\ (t) >> \frac{1}{\kappa\Lambda^2};\ frecuencias(w) << \kappa\Lambda^2. \end{gathered} \tag{5.88}$$

Estas condiciones implican que es equivalente estudiar la teoría con divergencias infrarrojas, que una teoría de campos con un valor del momento máximo ("cut-off") divergente. Nótese que gracias al reescalamiento, se puede hacer el límite simultáneo $\mu_{eff} \to 0$, $\Lambda \to \infty$, de forma que su producto sea finito, y sin necesidad de anular el coeficiente de $\underline{\Phi}^2$ se focaliza la atención en comportamientos de larga escala. Así, lo sucesivo, consideraremos un valor tan pequeño como se quiera, pero no nulo de la masa al cuadrado reescalada $\mu_{eff}^2\Lambda^2$ e integrales no acotadas en el espacio de momentos. De este modo, las divergencias infrarrojas originales de la teoría se sustituyen en la teoría reescalada por divergencias ultravioletas, que son las que hemos de analizar [18].
En contraste con la teoría de campos usual ahora las constantes de acoplamiento de la acción tienen una dependencia, dada a priori, en Λ [176]. Así pues, vamos a analizar las divergencias ultravioletas como en una teoría de campos usual y, después, veremos cómo afecta la dependencia en Λ de las constantes de acoplo.

Grado de divergencia de un diagrama.

Para estudiar las divergencias asociadas a cada tipo de término de la acción, o lo que es lo mismo a cada tipo de operador, consideramos su vértice asociado y analizamos las divergencias de los diagramas que se pueden construir a partir de él. Dado uno de tales diagramas hacemos las siguientes definiciones:

- B - número bucles.
- N - número de propagadores reversibles externos.
- M - número de propagadores irreversibles externos.
- n - número de propagadores reversibles internos.
- m - número de propagadores irreversibles internos.
- T - número de propagadores reversibles externos con un factor $\underline{q}^2$ asociado a su vértice.
- ν - número de vértices de el tipo dado.
- d - diménsión del sistema.
- r - número de "patas" o propagadores asociados a el vértice.

Con estas definiciones, y utilizando las relaciones siguientes:

$$\begin{aligned} n+m &= \frac{1}{2}(\nu r - N - M) \\ B &= n+m-\nu+1 \end{aligned} \tag{5.89}$$

[18] Una discusión detallada del uso de teorías de campos con "cut-off" infinito para estudiar fenómenos críticos puede encontrarse en [176, capítulos 21 y 22].

que se demuestran fácilmente, es un simple ejercicio de cálculo probar que, llamando δ_{NM} a la dimensión $[\Lambda]$ de la integral asociada a un cierto diagrama, también llamada grado de divergencia superficial, se tiene,

$$\begin{aligned}\delta_{NM} &= Bd - 2n + 2(c\nu - T) \\ &= d_{NM} + \nu\left[\frac{1}{2}(r-2)(d+2) + 2(c-a)\right] - 2T \\ &= d_{NM} - \nu\delta_{abc} - 2T \end{aligned} \tag{5.90}$$

donde notamos que d_{NM}, definido en (5.84), sólo depende de las patas externas y la dimensión, con lo que es una constante para todos los diagramas con N, M y d fijas. La dependencia en el orden perturbativo, ν, aparece en el segundo sumando.

Considerando ahora las potencias de Λ añadidas a cada diagrama por las constantes de acoplamiento se obtiene de forma inmediata que *para cada diagrama su grado de divergencia viene dado por* d_{NM}.
A partir de (5.84) se deduce que para toda dimensión d, con $d > 2$, las mayores divergencias ultravioletas, esto es, los mayores valores de d_{NM} se obtienen para los mínimos de N y M. En particular, la perturbación a la teoría libre más divergente es la dada por $N = 3$ y $M = 1$.

Trabajando en una dimensión espacial crítica, tal que d_{31} sea nulo, esto es, $d = 4$, el resto de los diagramas, con valores superiores de N y/o M no presentan divergencias adicionales, y las constantes de acoplamiento asociadas a dichos diagramas tienen dimensión en Λ negativa. En estos términos los operadores que aparecen en la acción pueden clasificarse en tres grupos:

1. Relevantes; con $d_{NM} > 0$: $\underline{\Phi\Psi}$, $\underline{\Psi}^2$. Su constante de acoplamiento tiene dimensiones positivas en Λ.
2. Marginales; con $d_{NM} = 0$: $\underline{\Phi}^3\underline{\Psi}$. Constante de acoplamiento adimensional en Λ.
3. Irrelevantes; con $d_{NM} > 0$: todos los restantes. Constantes de acoplamiento con dimensiones negativas en Λ.

Es sencillo demostrar que el único efecto de los operadores irrelevantes es modificar los valores de las constantes de acoplamiento desnudas de los operadores relevantes y marginales, y esto no afecta al comportamiento crítico del sistema [19]. Por tanto, para estudiar la criticalidad del modelo podemos eliminar por completo todos los efectos asociados a operadores irrelevantes, y entonces la acción queda reducida, excepto por el valor de los parámetros, a la forma (5.23). La relación entre los

[19] Véase [176], capítulos 22 y 24

coeficientes de los términos relevantes de nuestro lagrangiano y los del lagrangiano de Bausch -Janssen-Wagner es:

$$\mu \mapsto \tau \equiv \Lambda^2(p\mu_1^2+(1-p)\mu_2^2)+\textit{correcciones por operadores irrelevantes.} \quad (5.91)$$

y

$$\lambda \mapsto \lambda - 48\ d_3\gamma^2(p\mu_1^6+(1-p)\mu_2^6)+\textit{correcciones por operadores irrelevantes.} \quad (5.92)$$

donde hemos utilizado (5.60), y además, aparece un factor Ω adicional.
Consecuentemente *los cambios de fase de segundo orden de nuestro modelo fuera del equilibrio yacen en la misma clase de universalidad que la transición de fase asociada al modelo de equilibrio de Bausch-Janssen-Wagner [9], o lo que es lo mismo, que el modelo de Ising dinámico con parámetro de orden no conservado [74]. Así pues, la dependencia en la forma explícita de la dinámica microscópica de nuestro modelo resulta ser irrelevante en el estudio de la criticalidad del mismo, siendo este el principal resultado de este capítulo..*

Cálculo de los exponentes críticos

Por completitud, mostramos los cálculos explícitos, desde la renormalización, hasta la obtención de las leyes de escala y exponentes críticos para el modelo de dos temperaturas. La razón de ser de este apartado no radica en la originalidad de los resultados, sino en mostrar, como se puede culminar el desarrollo que hemos seguido a lo largo de la memoria en un caso concreto.
Para ello, consideramos el límite de $\Lambda \to \infty$ con τ finito. Por encima de $d = 4$ todas las integrales son finitas, mientras que para dimensiones $d = 4-\varepsilon$ con $\varepsilon > 0$ aparecen divergencias ultravioletas. Siguiendo la idea debida a Wilson y Fisher, y puesto que por encima de cuatro dimensiones sabemos de forma exacta cómo es el comportamiento crítico de la teoría, haremos un doble desarrollo perturbativo: en la constante de acoplamiento, λ, y en el parámetro ε, esto es, una prolongación analítica perturbativa del modelo, en torno a $d = 4$ [169, 170, 164, 176].
Para comenzar con la renormalización de la teoría definimos unos nuevos campos y constantes renormalizadas,

$$\begin{aligned} \underline{\Phi}_R &\equiv Z_{\Phi}^{-1/2}\underline{\Phi} \\ \underline{\Psi}_R &\equiv Z_{\Psi}^{-1/2}\underline{\Psi} \\ \tau_R &\equiv Z_{\tau}\tau \\ \kappa_R &\equiv Z_{\kappa}\kappa \\ u_R &\equiv Z_{\lambda}u \end{aligned} \quad (5.93)$$

donde tomamos como parámetros originales o *desnudos* de la teoría κ, τ y u, siendo este último el parámetro de Φ^4 escrito de forma adimensional,

$$u = \lambda\tau^{\frac{(d-4)}{2}} \quad (5.94)$$

Para completar la definición aún falta por especificar la forma de los factores Z. En estos términos las nuevas funciones vértice, renormalizadas, se relacionan con las antigüas según

$$\Gamma^R_{NM} = Z_\Phi^{N/2} Z_\Psi^{M/2} \Gamma_{NM}. \tag{5.95}$$

Los factores Z se fijan de tal modo que las divergencias de la teoría queden reabsorbidos en ellas, quedando de este modo una teoría finita. Para ello recurrimos a las siguientes *condiciones de normalización*:

$$\begin{aligned}
\partial_w \Gamma^R_{11}|_{P.N.} &= i && (5.96)\\
\partial_{\underline{q}^2} \Gamma^R_{11}|_{P.N.} &= \kappa_R && (5.97)\\
\partial_\tau \Gamma^R_{11}|_{P.N.} &= \kappa_R && (5.98)\\
\Gamma^R_{02}|_{P.N.} &= -2\kappa_R && (5.99)\\
\Gamma^R_{31}(-\underline{q}, -w, \underline{q}/3, w/3, \underline{q}/3, w/3, \underline{q}/3, w/3)|_{P.N.} &= \kappa_R u_R \mu_R^2 && (5.100)
\end{aligned}$$

siendo $P.N.$ un punto arbitrario de normalización. Por conveniencia tomamos $P.N.$ definido por el conjunto de condiciones siguiente:

$$\{w\} = 0, \qquad \{\underline{q}\} = 0, \quad y, \quad \tau = \mu_R^2. \tag{5.101}$$

donde μ_R^2 es una escala arbitraria de renormalización. Después aprovecharemos la libertad que tenemos de elegir μ_R para establecer la ecuación del grupo de renormalización.

Perturbativamente, incluyendo términos hasta segundo orden, las funciones vértices divergentes se expresan como:

$$\begin{aligned}
\Gamma^R_{11}(\underline{q}, w) &= \Gamma_{11}(\underline{q}, w) + F_1 + F_4 + F_5\\
\Gamma^R_{02}(\underline{q}, w) &= \Gamma_{02}(\underline{q}, w) + F_2\\
\Gamma^R_{31}(\{\underline{q}\}, \{w\}) &= \lambda\kappa + F_3 && (5.102)
\end{aligned}$$

donde F_i, $i = 1, .., 5$ son los valores de los diagramas de Feynman de la figura (5.3), que pueden depender de momentos y frecuencias externas, y han de ser evaluados explícitamente.

Los valores de dichos diagramas, y los de sus derivadas, evaluados en el punto de normalización, son:

$$\begin{aligned}
F_1 &= -\frac{1}{2\varepsilon} N_d \kappa u \mu_R^2\\
F_2 &= \frac{1}{4\varepsilon} N_d^2 \kappa u^2 \log\left(\frac{4}{3}\right)\\
F_3 &= -\frac{3}{2} N_d \left(\frac{1}{\varepsilon} - \frac{1}{2}\right) \kappa u^2 \mu_R^\varepsilon
\end{aligned}$$

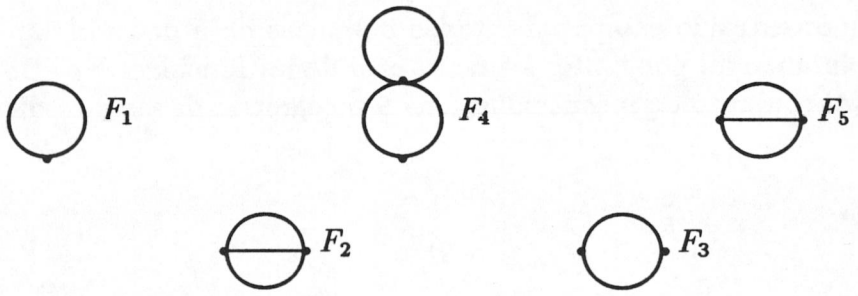


Figura 5.3: Diagramas de Feynman hasta segundo orden.

$$\begin{aligned} F_4 &= -\frac{1}{4}N_d^2\left(\frac{1}{\varepsilon^2}-\frac{1}{2\varepsilon}\right)\kappa u^2\mu_R^2 \\ \partial_w(F_5) &= -\frac{i}{8\varepsilon}N_d^2u^2\log\left(\frac{4}{3}\right) \\ \partial_\tau(F_5) &= \frac{1}{4\varepsilon^2}N_d^2\left(1-\frac{\varepsilon}{2}\right)\kappa u^2 \\ \partial_{q^2}(F_5) &= -\frac{1}{48\varepsilon}N_d^2\kappa u^2 \end{aligned} \tag{5.103}$$

En el apéndice F, damos algunas relaciones útiles para calcular las integrales que aparecen en los diagramas anteriores.
Desarrollamos los factores Z en series de potencias de la constante de acoplamiento adimensional renormalizada

$$\begin{aligned} Z_\Phi &= 1+b_1u_R+b_2u_R^2 \\ Z_\Psi &= 1+c_1u_R+c_2u_R^2 \\ Z_\kappa &= 1+k_1u_R+k_2u_R^2 \\ Z_u &= 1+a_1u_R \\ Z_\tau &= 1+t_1u_R+t_2u_R^2 \end{aligned} \tag{5.104}$$

y como estas funciones no dependen de $\underline{q}$, w ni de τ, (5.100) queda:

$$\begin{aligned} (1+b_1u_R+b_2u_R^2)^{\frac{1}{2}}(1+c_1u_R+c_2u_R^2)^{\frac{1}{2}}\partial_w\left(iw+uF_1+u^2(F_4+F_5)\right)|_{P.N.} &= i \\ (1+b_1u_R+b_2u_R^2)^{\frac{1}{2}}(1+c_1u_R+c_2u_R^2)^{\frac{1}{2}}\partial_{q^2}\left(iw+uF_1+u^2(F_4+F_5)\right)|_{P.N.} &= \kappa_R \\ (1+b_1u_R+b_2u_R^2)^{\frac{1}{2}}(1+c_1u_R+c_2u_R^2)^{\frac{1}{2}}\partial_\tau\left(iw+uF_1+u^2(F_4+F_5)\right)|_{P.N.} &= \kappa_R \\ (1+c_1u_R+c_2u_R^2)(-2\kappa+u^2F_2)|_{P.N.} &= -2\kappa_R \\ (1+b_1u_R+b_2u_R^2)^{\frac{3}{2}}(1+c_1u_R+c_2u_R^2)^{\frac{1}{2}}\partial_\tau\left(\kappa u\mu_R^\varepsilon+uF_1+u^2(F_4+F_5)\right)|_{P.N.} &= \kappa_Ru_R\mu_R^\varepsilon \end{aligned} \tag{5.105}$$

donde hemos extraido explícitamente las potencias de u de cada uno de los diagramas (eliminando, por tanto, los factores u de las funciones F) . De este modo tenemos un conjunto de 9 ecuaciones con 9 incógnitas, de cuya resolución se obtiene:

$$\begin{aligned}
a_1 &= \mu_R^{-\epsilon}\kappa^{-1}F_3 \\
b_1 &= 0 \\
b_2 &= i\partial_w(F_5) - \frac{1}{2}\kappa^{-1}F_2 - \kappa^{-1}\partial_{q^2}(F_5) \\
c_1 &= 0 \\
c_2 &= \frac{1}{2}\kappa^{-1}F_2 + i\partial_w(F_5) + \kappa^{-1}\partial_{q^2}(F_5) \\
\kappa_1 &= 0 \\
\kappa_2 &= i\partial_w(F_5) + \kappa^{-1}\partial_{q^2}(F_5) \\
\tau_1 &= \kappa^{-1}\partial_\tau(F_1) \\
\tau_2 &= \kappa^{-1}\partial_\tau(F_4+F_5) - \kappa^{-2}\mu_R^{-\epsilon}F_3\partial_\tau(F_1) - \kappa^{-1}\partial_{q^2}(F_5)
\end{aligned} \tag{5.106}$$

Determinados los factores Z, buscamos ahora su relación con los exponentes críticos de la teoría. Para ello planteamos la ecuación de *grupo de renormalización*:

$$\mu_R\partial_{\mu_R}\Gamma_{NM} = 0 \tag{5.107}$$

donde la derivada se toma con u, τ y κ constantes. Esta condición expresa el hecho evidente de que las funciones vértice desnudas no dependen del parámetro de renormalización μ_R. Sustituyendo (5.95) en (5.107) se obtiene,

$$\left[\mu_R\partial_{\mu_R} - \frac{M}{2}\sigma_\Psi - \frac{N}{2}\sigma_\Phi + \beta(u_R)\partial_{u_R} + +\kappa_R\varsigma\partial_{\kappa_R} + \tau_R\zeta\partial_{\tau-R}\right]\Gamma^R_{NM} = 0 \tag{5.108}$$

donde hemos definido,

$$\begin{aligned}
\sigma_\Phi &= \mu_R\partial_{\mu_R}\log(Z_\Phi) \\
\sigma_\Psi &= \mu_R\partial_{\mu_R}\log(Z_\Psi) \\
\beta(u_R) &= \mu_R\partial_{\mu_R}u_R \\
\varsigma &= \mu_R\partial_{\mu_R}\log(Z_\kappa); \qquad \mu_R\partial_{\mu_R}\kappa_R = \kappa_R\varsigma \\
\zeta &= \mu_R\partial_{\mu_R}\log(Z_\tau); \qquad \mu_R\partial_{\mu_R}\tau_R = \tau_R\zeta.
\end{aligned} \tag{5.109}$$

La ecuación (5.108) en derivadas parciales puede integrarse mediante el método de las curvas características [20], que conduce al siguiente conjunto de ecuaciones:

[20] Véase apéndice D, y/o [32].

$$\frac{d\mu_R}{d\rho} = \mu_R \tag{5.110}$$

$$\frac{d\kappa_R}{d\rho} = \kappa_R\varsigma \tag{5.111}$$

$$\frac{du_R}{d\rho} = \beta(u_R) \tag{5.112}$$

$$\frac{d\tau_R}{d\rho} = \tau_R\zeta \tag{5.113}$$

$$\frac{d\Gamma^R_{NM}}{d\rho} = \frac{N}{2}\sigma_\Phi\Gamma^R_{NM} + \frac{M}{2}\sigma_\Psi\Gamma^R_{NM} \tag{5.114}$$

donde ρ es un parámetro que gobierna el flujo de la ecuación diferencial [21]. Integrando (5.112), se tiene $\mu_R(\rho) = \mu_R(0)\exp(\rho)$, de donde ρ puede interpretarse como una escala que permite conectar los distintos puntos de normalización y por lo tanto las distintas formas de renormalizar la teoría en el esquema que estamos considerando, esto es, las distintas formas de fijar la escala μ_R^2. Si definimos $l = \exp(\rho)$, queda, $\mu_R(l) = \mu_R(1)l$, con lo que integrando (5.114) se obtiene,

$$\Gamma^R_{NM}(l) = \Gamma^R_{NM}(l=1)\exp\left[\frac{1}{2}\int_1^l \frac{dl}{l}\sigma_{NM}\right] \tag{5.115}$$

siendo $\sigma_{NM} \equiv N\sigma_\Phi + M\sigma_{Psi}$. Reescribimos ahora las funciones vértice de la siguiente manera, en términos de una función homogénea [154, 6]:

$$\Gamma^R_{NM}(\{q\},\{w\},\mu_R,\tau_R,\kappa_R,u_R) = \kappa_R\mu_R^{d_{NM}}\mathcal{G}_{NM}\left(\left\{\frac{q}{\mu_R}\right\},\left\{\frac{w}{\kappa\mu_R^2}\right\},\frac{\tau_R}{\mu_R^2},u_R\right) \tag{5.116}$$

con lo que se obtiene,

$$\mathcal{G}_{NM}(l) = \mathcal{G}_{NM}(1)l^{-d_{NM}}\exp\left[\frac{1}{2}\int_1^l \frac{dl}{l}\sigma_{NM}\right] \tag{5.117}$$

y tenemos la forma en que se modifican las funciones vértice al cambiar la escala. Nótese que su comportamiento es más complicado que un simple escalamiento potencial. Para estudiar su comportamiento crítico haremos la hipótesis de que existe un punto fijo, estable en el infrarrojo [6], del flujo (5.110)-(5.113), y que dicho punto fijo, invariante de escala, corresponde al punto crítico. Resolviendo $\beta(u_R) = 0$ en primer orden de perturbaciones se encuentra que dicho punto fijo, u_R^*, existe, y es inmediato comprobar que es estable en el infrarrojo. Notamos $\varsigma^*, \zeta^*, \tau^*, \sigma^*_{NM}$ a los valores de ς, ζ, τ y σ_{NM} en u_R^*, respectivamente, con lo que

[21] Análogo al tiempo en las ecuaciones de Hamilton de la mecánica.

evaluando la relación (5.117) en el punto fijo se obtienen relaciones de escala sencillas para las funciones vértice. En particular, evaluando (5.117) en el punto fijo, sustituyendo el resultado en (5.116), y tomando $l = q/\mu_R$ se tiene para $N = M = 1$,

$$\mathcal{G}_{11}^{R,crit}(q, w, \mu_R, \tau_R, \kappa_R) = \kappa_R q^2 \left(\frac{q}{\mu_R}\right)^{\varsigma^* - \frac{\sigma_{11}^*}{2}} \mathcal{G}_{11}\left(\frac{w}{\kappa q^{2+\varsigma^*} \mu_R^{-\varsigma^*}}, \frac{\tau}{q^{2-\zeta^*} \mu_R^{\zeta^*}}\right) \tag{5.118}$$

de donde, sin más que comparar el primer argumento de la función con la definición del exponente crítico dinámico [9], z, se obtiene,

$$z = 2 + \varsigma^* \tag{5.119}$$

y comparando el segundo con el exponente para la longitud de correlación ν, [6, 9] se tiene:

$$\nu = \frac{1}{2 - \zeta^*}. \tag{5.120}$$

De este modo, hemos relacionado los puntos fijos del grupo de renormalización con exponentes críticos de la teoría. De forma análoga, pueden encontrarse otras relaciones como, por ejemplo, [9]:
Exponente para la dimensión anómala de Φ [6, 9]

$$\eta_\Phi = \sigma_\Phi^* \tag{5.121}$$

y exponente para la dimensión anómala de Ψ [9]

$$\eta_\Psi = \sigma_\Psi^*. \tag{5.122}$$

Otros exponentes pueden deducirse a partir de leyes de escala, [154, 6] [22].
Sin más que sustituir (5.106) en (5.109),

$$\begin{aligned} u_R^* &= -\frac{1}{a_1} \\ \sigma_\Phi^* &= \frac{\varepsilon}{a_1^2}(2b_2 - b_1^2) \\ \sigma_\Psi^* &= \frac{\varepsilon}{a_1^2}(2c_2 - c_1^2) \\ \zeta^* &= \frac{\varepsilon}{a_1^2}(2t_2 - t_1^2) \end{aligned} \tag{5.123}$$

[22] Para evaluar el exponente α del calor específico es necesario hacer la renormalización de operadores compuestos [9]. Todos los restantes pueden deducirse mediante relaciones de escala.

y sustituyendo (5.106) y (5.103) en (5.123) se obtienen finalmente los exponentes críticos de la teoría:

$$\begin{aligned} u_R^* &= \frac{2\varepsilon}{3N_d} + \Theta(\varepsilon^2) \\ \eta_\Phi &= \frac{\varepsilon^2}{54} + \Theta(\varepsilon^3) \\ \eta_\psi &= \frac{\varepsilon^2}{27}\left[6\log\frac{4}{3} - \frac{1}{2}\right] + \Theta(\varepsilon^3) \\ \nu &= \frac{1}{2} + \frac{\varepsilon}{12} + \Theta(\varepsilon^2) \\ z &= 2 + \frac{\varepsilon^2}{9}\left[\log\frac{4}{3} - \frac{1}{6}\right] + \Theta(\varepsilon^3). \end{aligned} \tag{5.124}$$

Los exponentes estáticos coinciden con los obtenidos con teoría de campos de equilibrio para el modelo hamiltoniano Φ^4, [6, 176], mientras que z es el exponente crítico dinámico para el modelo A de Hohenberg y Halperin [74, 9].

Anomalías en el modelo de no-equilibrio.

A pesar de que la dependencia en la dinámica microscópica resulta ser irrelevante en los cambios de fase de segundo orden de nuestro modelo, sus efectos pueden manifestarse de otros modos que analizamos en este apartado. Estos efectos tienen su origen en la estructura de los parámetros desnudos del modelo fuera del equilibrio, dada en (5.91) y (5.92).

1. *Tricriticalidad.*
   Analizando la ecuación (5.92), se observa que el coeficiente de $\Phi^3\underline{\Psi}$ puede anularse para ciertos valores de los parámetros. Esta condición implica la presencia de un punto tricrítico en $\lambda = 48 d_3 \gamma^2 (p\mu_1^6 + (1-p)\mu_2^6)$, a partir del cual, los cambios de fase dejan de ser de segundo orden para hacerse discontínuos o de primer orden [98].

   En particular, tanto para la dinámica de Glauber, $d_3 = 1/24$, como para la de V.B.S., $d_3 = -1/48$, se tiene una solución de la ecuación anterior. Nótese que estamos imponiendo la condición de que se anule el coeficiente de $\Phi^3\underline{\Psi}$ en la acción desnuda, lo cual es equivalente a decir que se tiene un punto tricrítico en aproximación de punto silla, o en teoría de perturbaciones sin bucles [6, 176, 144]. Esto no implica que en la teoría resuelta de forma exacta subsistan puntos tricríticos. De hecho es probable, que al considerar las contribuciones de términos irrelevantes así como órdenes superiores de teoría de perturbaciones, se pierda dicho efecto. En el apéndice F hemos estudiado mediante una simulación Monte Carlo un modelo con dos temperaturas

análogo al que aquí tratamos con teoría de campos, y no encontramos cambios de fase de primer orden ni puntos tricríticos para el rango de valores de los parámetros considerado.
En el supuesto de que el modelo presentara, en efecto, un punto tricrítico, sus exponentes asociados podrían calcularse tomando como perturbación más relevante a la teoría libre la dada por el operador $\Phi^5\Psi$, este es, por tanto, un operador peligrosamente irrelevante [23]. Del mismo modo que hemos probado que el comportamiento crítico de nuestro modelo coincide con el de su análogo de equilibrio, se demuestra del mismo modo que el comportamiento tricrítico es el de la clase de universalidad del modelo Φ^6 de equilibrio.

2. *Exponentes críticos efectivos.*
Aunque nuestro modelo yace en la misma clase de universlidad que el modelo dinámico de Ising, podría ocurrir que los exponentes críticos no coincidiesen con los del sistema de equilibrio. Por ejemplo, los exponentes críticos térmicos se calculan respecto a la variable τ, que en equilibrio se comporta como $T - T_{crit}$ en las vecindades del punto crítico. Sin embargo, fuera del equilibrio, τ tiene una dependencia más complicada en las dos temperaturas así como en el resto de los parámetros. Conocidos los exponentes críticos respecto a τ, las relaciones (5.91) y (5.92) permiten determinar el comportamiento crítico en función de μ_1, μ_2 o p, es decir, de los parámetros originales de la teoría. Así, fijados μ_1 y p, se obtiene una relación de la forma

$$\mu_2^2 - \mu_{2,crit}^2 \approx A\,\tau \tag{5.125}$$

de tal modo que, como $\tau \approx T - T_{crit}$ y $\mu_2^2 \approx T_2 - T_{2,crit}$, los exponentes coinciden con los de la teoría de equilibrio, salvo en aquellos puntos en que se anule la amplitud A, donde se reescalan por un factor 2, pues en dicho caso $\mu_2^2 - \mu_{2,crit}^2 \approx B\,\tau^2$.
Procediendo del mismo modo se obtiene los exponentes en función de μ_1 y de p, obteníendose el mismo comportamiento en todos los casos, pues:

$$\mu_1^2 - \mu_{1,crit}^2 \approx C\,\tau \tag{5.126}$$

fijados μ_2 y p, y

$$p - p_{crit} \approx D\,\tau \tag{5.127}$$

con μ_1 y μ_2.

[23] Una referencia general sobre tricriticalidad es [98]. El estudio de las relaciones de escala en puntos tricríticos puede encontrarse en [146, 147]. Para el análisis de los exponentes tricríticos mediante técnicas perturbativas nos remitimos [81, 99, 107, 108, 155, 156], y para la renormalización, en general, de operadores irrelevantes a [6]. Véase también, el apéndice F.

Resumen y conclusiones.

En esta tesis hemos desarrollado un formalismo general para estudiar fenómenos críticos fuera del equilibrio en sistemas definidos mediante una ecuación maestra. Para ello hemos introducido un método que nos permite modelar cada sistema concreto mediante una ecuación de Fokker-Planck , satisfaciendo un conjunto de requisitos mínimos, impuestos previamente. Entre dichos requisitos están los de tener las mismas soluciones deterministas que el problema original, tener asociado un mismo potencial estacionario en un entorno de las soluciones deterministas y, reproducir, en los límites de equilibrio, la distribución estacionaria exacta.

De este modo se garantiza que la ecuación de Fokker-Planck conserva las mismas características críticas estáticas que el modelo original.
Partiendo de una ecuación de Fokker-Planck genérica hemos construido una representación de su solución en términos de integrales de camino, o lo que es lo mismo, un lagrangiano y funcional generador asociados. Estos constituyen la base para el desarrollo de una teoría perturbativa sistemática, que de lugar a unas funciones respuesta causales (requisito este no satisfecho por otras representaciones de integrales de camninos utilizadas en la literatura). La renormalización y posterior resolución de la ecuación de grupo de renormalización, de cada modelo concreto, llevan a la obtención de los exponentes críticos y determinación de la clase de universalidad en que yace el modelo.
En particular, hemos aplicado la estrategia planteada a un modelo de espines con dos mecanismos dinámicos locales en competición, cada uno de ellos caracterizado por una temperatura diferente, concluyendo que pertenece a la clase de universalidad del modelo de Ising de equilibrio.
Este resultado coincide con el predicho, por el *argumento de Grinstein.* En efecto, según éste, al ser un modelo con simetría arriba-abajo y sin parámetro de orden conservado ha de pertenecer tanto estática como dinámicamente a la clase de universalidad del modelo de Ising. Así pues, el punto fijo de Ising, es estable bajo cambios en la forma funcional de la dinámica microscópica, y nuestro formalismo no parece aportar nada esencialmente nuevo respecto a la criticalidad de este modelo. Sin embargo, dada la generalidad del método propuesto, es posible analizar otros modelos de no equilibrio, más complejos, en los que, quizá, la forma de la dinámica microscópica pueda jugar un papel más decisivo.

Los posibles cambios que puede experimentar el funcional generador asociado, a un cierto modelo de no equilibrio, ante modificaciones de la forma funcional de la dinámica microscópica, son de dos tipos esencialmente distintos:

1. Cambios de sus coeficientes.
2. Cambios estructurales.

Los cambios de los coeficientes del desarrollo del lagrangiano en series de potencias no afectan esencialmente a la criticalidad del modelo. Pueden llevar, eso sí, a la anulación eventual del coeficiente de algún término relevante, por lo que en dicha situación se hace necesario considerar operadores *peligrosamente irrelevantes*, pudiendo aparecer puntos tricríticos y puntos de Lifshitz. Este es el único tipo de cambio que observamos en el modelo con dos temperaturas. En particular, en los límites de equilibrio, los coeficientes son tales que se producen cancelaciones perturbativas, de modo que contribuyen muchos menos diagramas a las correlaciones estacionarias, que en los casos de no equilibrio. Así aunque en equilibrio y fuera del equilibrio pueda tenerse una misma estructura analítica para el lagrangiano, la cancelación de diagramas en el equilibrio, es el mecanismo que podría inducir comportamientos críticos diferentes en ambas situaciones.
Para dinámicas como las de Glauber (1.11) o la V.B.S. (1.13), analíticas, la intuición desarrollada nos hace pensar que no aparecerán variaciones esenciales del comportamiento crítico de unas respecto a otras independientemente del modelo que consideremos.

No obstante, si en alguna situación concreta, un cambio en la dinámica indujese un cambio estructural en el lagrangiano, entonces el comportamiento crítico de la teoría se vería gravemente afectado. En esta dirección, es interesante el análisis modelos definidos por dinámicas como la de Metropolis (1.12) que al ser no diferenciables para incrementos nulos de la energía, podrían presentar algún tipo de anomalía. Otra situación interesante en la que pretendemos aplicar, también, este formalismo es el análisis de *sistemas difusivos en presencia de campo electrico* [24], sobre cuyo comportamiento crítico existen discrepancias, según se analice el problema con unas u otras técnicas (véase, por ejemplo, [165, 103, 104, 105, 84, 174].

En cualquier caso, todos los indicios parecen apuntar a que, *los detalles de la dinámica microscópica no afectan al comportamiento crítico de los sitemas fuera del equilibrio tan fuertemente como lo hacen a la estructura de sus respectivos diagramas de las fases.*

[24] Driven diffusive systems. Aunque estos modelos no presentan una competición de dinámicas, pueden incluirse sin ninguna dificultad adicional en nuestro formalismo.

Apéndice A

Consecuencias de la condición de balance detallado.

Considerando la condición de balance detallado (1.8) y desarrollando la función $D[\lambda]$ en series de Taylor en torno a $\lambda = 0$ se obtienen las siguientes relaciones orden o orden en λ

$$D^{(1)}[0] = -\frac{1}{2} \tag{A.1}$$

$$D^{(3)}[0] = \frac{1 - 6D^{(2)}[0]}{4} \tag{A.2}$$

$$D^{(4)}[0] = D^{(2)}[0] - \frac{1 + 2D^{(5)}[0]}{5} \tag{A.3}$$

donde $D^{(n)}$ es la derivada n-ésima de la función D. Existen relaciones análogas para órdenes superiores que no especificamos.

Apéndice B

Equivalencias en integrales de camino.

Equivalencias en el integrando.

Teorema:

Consideremos la siguiente integral de camino discretizada en función del parámetro α,

$$I = \int\int ... \int dq_0 dq_1 ... dq_{N-1} \prod_{i=0}^{N-1} \exp\left[-\frac{1}{2\varepsilon} g(\tilde{q}_i)\Delta_i{}^2\right] \left[A(\tilde{q}_i)\Delta_i{}^k B(q_i)\right] \qquad \text{(B.1)}$$

con k=2,3,4,6. La función $\Delta_i{}^k$ en el integrando puede sustituirse dependiendo del valor de k del siguiente modo:

$$\begin{aligned} \Delta_i{}^2 &\doteq \frac{\varepsilon}{g(\tilde{q}_i)} \\ \Delta_i{}^3 &\doteq \frac{3\varepsilon\Delta_i}{g(\tilde{q}_i)} \\ \Delta_i{}^4 &\doteq \frac{3\varepsilon^2}{g(\tilde{q}_i)^2} \\ \Delta_i{}^6 &\doteq \frac{15\varepsilon^3}{g(\tilde{q}_i)^3} \end{aligned} \qquad \text{(B.2)}$$

sin que ello afecte al resultado de la integral en el límite $\varepsilon \to 0$ [49, 122, 97]. Utilizamos el símbolo $\doteq$, originalmente introducido por DeWitt [171], para representar equivalencia en integrales de camino. Nótese que la equivalencia es válida para cualquier valor del parámetro de discretización α.

Demostración:

i) K=2.

Comencemos considerando la primera integral en orden creciente de tiempos.

$$I_0 = \int dq_0 \exp\left[-\frac{1}{2\varepsilon} g(\tilde{q}_0)\Delta_0{}^2\right]\left[A(\tilde{q}_0)\Delta_0{}^2 B(q_0)\right] \tag{B.3}$$

Desarrollando todas las funciones de $\tilde{q}_0$ y q_0 en torno al punto posterior, q_1 y excluyendo infinitésimos de orden $\varepsilon^{3/2}$, queda

$$I_0 = \int dq_0 \exp\left[-\frac{1}{2\varepsilon} g(q_1)\Delta_0{}^2\right]\left[A(q_1)\Delta_0{}^k B(q_1)\right] + \Theta(\varepsilon^{3/2}) \tag{B.4}$$

por lo que cambiando la variable de integración de q_0 a Δ_0, y haciendo uso de la integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-ax^2)x^m = \Gamma\left[\frac{m+1}{2}\right] a^{-\frac{m+1}{2}} \tag{B.5}$$

con $m = 2$, se comprueba directamente que el resultado de I_0 sería el mismo, salvo infinitésimos de órdenes superiores, haciendo la sustitución $\Delta_i{}^2 \doteq \varepsilon/g(\tilde{q}_i)$.

Repitiendo el mismo proceso para los tiempos sucesivos [1] se obtiene el resultado final, válido en el límite $\varepsilon \to 0$.

ii, iii) K=4, K=6.

Se prueban de forma completamente análoga al caso anterior.

iv) K=3.

Sustituyendo en (B.3) $k = 2$ por $k = 3$, y desarrollando en torno al punto posterior, se tiene

$$I_0 = \int dq_0 \exp\left[-\frac{1}{2\varepsilon} g(q_1)\Delta_0{}^2\right]\left[A(q_1)B(q_1)\right]$$
$$\left[\frac{\Delta_0{}^3}{\varepsilon} - \frac{\Delta_0{}^6 \alpha g'(q_1)}{2\varepsilon^2} + \frac{\alpha A(q_1)\Delta_0{}^4}{A(q_1)\varepsilon} + \frac{B(q_1)\Delta_0{}^4}{B(q_1)\varepsilon}\right] + \Theta(\varepsilon^{3/2}) \tag{B.6}$$

[1] Nótese que para todo tiempo posterior, t_j, la integral I_j conserva la forma genérica de I_0, aunque la función $B(q_j)$ pueda ser diferente.

y haciendo las sustituciones implicadas por los puntos i, ii, e, iii, quedan cuatro sumandos en el factor del integrando:

$$\left[\frac{3\Delta_0}{g(q_1)} - \frac{15\alpha\varepsilon g'(q_1)}{2g(q_1)^3} + \frac{3\varepsilon\alpha A'(q_1)}{A(q_1)g(q_1)^2} + \frac{3\varepsilon B'(q_1)}{B(q_1)g(q_1)^2}\right] \tag{B.7}$$

Es directo comprobar que haciendo la sustitución ${\Delta_i}^3 \doteq 3\varepsilon\Delta_i/g(\tilde{q}_i)$ en I, y desarrollando consistentemente se recupera este último resultado. Nuevamente basta con iterar para tiempos sucesivos para tener provada la equivalencia.

La generalización de estas equivalencias a integrales con más variables fue introducida, en un contexto diferente, por McLaughlin y Schulman [122]. Otra referencia útil es la serie de artículos de Langouche, Roekaerts y Tirapegui [97].

Equivalencias exponenciales.

Usualmente las potencias de los incrementos Δ_i aparecen en el argumento de una exponencial, en las integrales de camino que estudiamos en esta tesis. Es, por tanto, interesante saber cuales son las reglas de transformación en este caso sin necesidad de desarrollar las exponenciales en series de potencias hacer las transformaciones dadas en el apartado anterior y volver a reescribir las exponenciales en cada caso.

Teorema.

Cuando en el argumento de una integral de camino del tipo de (B.1) aparece $\exp({\Delta_i}^k)$ en lugar de ${\Delta_i}^k$, las reglas de equivalencia son las siguientes:

$$\begin{aligned}
\exp\left(a{\Delta_i}^2\right) &\doteq \exp\left(a\frac{\varepsilon}{g(\tilde{q}_i)}\right) \\
\exp\left(a\frac{{\Delta_i}^3}{c}\right) &\doteq \exp\left(\frac{3a\Delta_i}{g(\tilde{q}_i)} + \frac{3a^2\varepsilon}{g(\tilde{q}_i)^3}\right) \\
\exp\left(a\frac{{\Delta_i}^4}{\varepsilon}\right) &\doteq \exp\left(\frac{3a\varepsilon}{g(\tilde{q}_i)^2}\right)
\end{aligned} \tag{B.8}$$

donde a es una constante, o función que no depende de D_i.

Demostración.

Se prueba desarrollando la exponencial en series de Taylor, despreciando infinitésimos de orden $\varepsilon^{3/2}$, utilizando las equivalencias del apartado anterior y volviendo a reeescribir las exponenciales. Es importante notar que estas reglas de transformación siguen siendo válidas en el caso de que aparezca más de un sumando con potencias de Δ_i en el argumento de la exponencial, como puede comprobarse directamente.

UNIVERSIDAD DE GRANADA
1 8 MAR. 1994
COMISION DE DOCTORADO

Apéndice C

Condición de potencialidad.

Consideremos una ecuación de Fokker-Planck genérica, escrita como:

$$\partial_t P_t(\underline{q}) = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(K_i(\underline{q}) P_t(\underline{q}) + \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial}{\partial q_j} K_{ij}(\underline{q}) P_t(\underline{q}) \right). \tag{C.1}$$

Su solución estacionaria puede ser hallada directamente por cuadraturas, siempre y cuando los coeficientes satisfagan unas ciertas condiciones: *condiciones de potencialidad.*
Consideramos separadamente dos situaciones:

1. **Coeficiente de difusión constante.** Sea $K_{ij} = K = cte$. Para tener una solución estacionaria se requiere que

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial}{\partial q_i} J_i(\underline{q}) \equiv \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial}{\partial q_i} P_t(\underline{q}) \left(K_i(\underline{q}) + K \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial}{\partial q_j} \log(P_t(\underline{q})) \right) = 0 \tag{C.2}$$

   Supongamos que tenemos una sola variable $n = 1$, y supongamos condiciones de contorno naturales, esto es, que tanto la función de distribución como la corriente de probabilidad, $J_1(q_1)$ se anulan en el infinito. De este modo, la solución estacionaria viene dada por

$$J_1 = P_{est}(q_1) \left[K_1(q_1) + K \frac{\partial}{q_1} \log(P_{est}(q_1)) \right] = 0 \tag{C.3}$$

   e integrando se obtiene la forma expl cita de la distribuci n estacionaria,

$$P_{est}(q_1) = N \exp\left(\frac{1}{K} \int^{q_1} dp\, K_1(p) \right). \tag{C.4}$$

   Sin embargo, para $n \geq 2$ no se puede garantizar que cada una de las corrientes de probabilidad $J_i(\underline{q})$ sea nula en el estado estacionario. No obstante,

podemos comenzar ensayando soluciones con $J_i(\underline{q}) = 0$. A partir de (C.2), como $P_{est} \neq 0$, debe ocurrir que

$$K_i(\underline{q}) = -K\frac{\partial \log(P_{est}(\underline{q}))}{\partial q_i}, \qquad i = 1, 2, ..., n \tag{C.5}$$

esto es, K_i ha de ser la derivada de una cierta función (potencial) para todos los valores de i. Condición necesaria y suficiente para la exitencia de una tal función, son las *condiciones de potencialidad* [148, 56, 89]

$$\frac{\partial K_i(\underline{q})}{\partial q_j} = \frac{\partial K_j(\underline{q})}{\partial q_i}, \qquad \forall\, i, j. \tag{C.6}$$

En el caso de que esta condicíon sea satisfecha, la solución puede escribirse expl citamente en funci n de la siguiente integral de l nea

$$P_{est}(\underline{q}) = N\exp(-V(\underline{q})) = N\exp\left(-\int^{(\underline{q})} dp_i K_i(\underline{p})\right) \tag{C.7}$$

donde dado un punto inicial arbitrario, $\underline{q}_0$, que fija la constante de normalizaci n N, la integral que define el valor del potencial $V(\underline{q})$ en un punto gen rico $\underline{q}$ no depende del camino que se considere conectando $\underline{q}_0$ y $\underline{q}$: el potencial es una *funci n de estado.*

2. **Coeficiente de difusión arbitrario.** Consideramos ahora un conjunto de valores arbitrarios, K_{ij}. En este caso general, $K_i(\underline{q})$ puede descomponerse en dos sumandos:

$$K_i(\underline{q}) = K_i^{(1)}(\underline{q}) + K_i^{(2)}(\underline{q}) \tag{C.8}$$

de modo que

$$K_i^{(1)}(\underline{q}) = -\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial K_{ij}(\underline{q})}{\partial q_j} - K_{ij}(\underline{q})\frac{\partial \log P_{est}(\underline{q})}{\partial q_j} \tag{C.9}$$

y

$$\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial}{\partial q_i}\left[K_i^{(2)}(\underline{q})P_{est}(\underline{q})\right] = 0 \tag{C.10}$$

Si existe la matriz inversa de la matriz de difusión (formada por los elementos $K_{ij}(\underline{q})$), y llamamos a sus componentes L_{ij} podremos escribir

$$A_i(\underline{q}) \equiv \frac{\partial V(\underline{q})}{\partial q_i} = L_{ij}\left[\frac{\partial K_{jk}}{\partial q_k} + K_j^{(1)}\right] \tag{C.11}$$

siempre y cuando se cumplan unas condiciones an logas a las del caso anterior, *condiciones de potencialidad generalizadas*:

$$\frac{\partial A_i(\underline{q})}{\partial q_j} = \frac{\partial A_j(\underline{q})}{\partial q_i}, \qquad \forall\, i, j. \tag{C.12}$$

y consecuentemente,

$$P_{est}(\underline{q}) = N \exp(-V(\underline{q})) = N \exp\left(-\int^{(\underline{q})} dp_i A_i(\underline{p})\right) \qquad \text{(C.13)}$$

y nuevamente tenemos una integral de l nea independiente del camino seguido para conectar extremos fijos.

La dificultad en este caso estriba, en que sin conocer la solución estacionaria a priori, no hay forma de saber como descomponer K_i en sus dos componentes. Usualmente se considera como prueba $K_i^{(2)} = 0$ y se ensaya la condición de potencialidad. Si ésta no es satisfecha se pueden probar otras posibles descomposiciones.

En casos en que se cumpla una condición de balance detallado es posible identificar $K_i^{(1)}$ y $K_i^{(2)}$ con las componentes irreversible y reversible, respectivamente de K_i. En situaciones de no equilibrio, no es posible hacer tal descomposición [56, 148].

Apéndice D

Resolución de una ecuación de Hamilton Jacobi.

Sea $S_t(\underline{v})$ un funcional de clase C^∞ definido sobre el producto directo de un dominio abierto, U, del espacio de configuración, Γ, con un intervalo de la recta real, $[0,t']$. Sea $R_t(\underline{\Phi},\underline{v})$ una función real C^∞ sobre un dominio abierto, V, del espacio de las fases, F, producto directo con un intervalo temporal $[0,t']$. $R_t(\underline{\Phi},\underline{v})$ es tal que existe una aplicación no singular e invertible, ψ, tal que para cada tiempo $t \in [0,t']$, transforma el punto $(\underline{\Phi},\underline{v}) \in V$ en $\psi(\underline{\Phi},\underline{v}) = (\underline{\Phi}',\underline{v})$, con $\Phi'(\underline{r}) = \delta R(\underline{\Phi},\underline{v})/\delta\underline{\Phi}(\underline{r})$.
Supongamos que $S_t(\underline{v})$ es una solución de la siguiente ecuación, de tipo Hamilton-Jacobi

$$\partial_t S_t(\underline{v}) + R_t\left(\frac{\delta S_t(\underline{v})}{\delta \underline{v}}, \underline{v}\right) = 0. \tag{D.1}$$

Consideremos la siguiente ecuación diferencial

$$\partial_t v_t(\underline{r}) = \frac{\delta R_t\left(\dfrac{\delta S_t(\underline{v}_t)}{\delta \underline{v}_t}, \underline{v}_t\right)}{\delta \dfrac{\delta S_t(\underline{v}_t)}{\delta v_t(\underline{r})}} \tag{D.2}$$

con la condición de contorno $\underline{v}_{t_0} = \underline{v}^{(0)}$, y $t_0 \in [0,t']$. Supongamos que para todo $\underline{v}^{(0)} \in U$ y $t_0 \in [0,t']$, podemos resolver la ecuación diferencial (D.2) para t próximo a t_0.

Entonces, definiendo $\pi_t(\underline{r}) \equiv \delta S_t(\underline{v}_t)/\delta v_t(\underline{r})$ las funciones $\underline{v}_t$ y $\underline{\pi}_t$ son soluciones de las ecuaciones de Hamilton asociadas al hamiltoniano $R_t(\underline{\pi},\underline{v})$, verificando que $\underline{v}_{t_0} = \underline{v}^{(0)}$ y $\pi_{t_0}(\underline{r}) = \delta S_{t_0}(\underline{v}_{t_0})/\delta v_{t_0}(\underline{r})$. Finalmente

$$S_t(\underline{v}_t) = \int_{t_0}^{t} d\tau \left[\underline{\pi}_\tau . \partial_\tau \underline{v}_\tau - R_\tau(\underline{\pi}_\tau, \underline{v}_\tau)\right]. \tag{D.3}$$

Apéndice E

Evaluación de integrales.

En este apéndice damos algunas identidades útiles para resolver las integrales que aparecen en el capítulo 5.

1. **Volumen de la esfera d-dimensional** [140]:

$$N_d = \frac{2}{(4\pi)^{(d/2)}\Gamma(\frac{d}{2})}. \tag{E.1}$$

2. **Desarrollos de las funciones Gamma de Euler** [36]:

$$\Gamma(\alpha - 1) = -\frac{1}{\alpha} - (1 - \gamma) + \Theta(\alpha) \tag{E.2}$$

$$\Gamma(\alpha + 1) = 1 - \gamma\alpha + \Theta(\alpha^2) \tag{E.3}$$

$$\Gamma(\alpha)\Gamma(1 - a) = \frac{\pi}{\sin(\alpha\pi)} \tag{E.4}$$

donde $\gamma = 0.577215...$ es la constante de Euler.

3. **Algunas integrales** [54]:

$$\int_{R^d} d\underline{q}^d \frac{1}{(\underline{q}^2 + 2\underline{K}\underline{q} + m^2)^\alpha} = \pi^{d/2}\frac{\Gamma(\alpha - d/2)}{\Gamma(\alpha)}(m^2 - K^2)^{d/2-\alpha} \tag{E.5}$$

$$\int_0^\infty dx \exp(-ax)x^{\alpha-1} = a^{-\alpha}\Gamma(\alpha) \tag{E.6}$$

$$\int_0^1 dx x^{\alpha-1}(1 - x)^{\beta-1} = \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha + \beta)} \tag{E.7}$$

Una estrategia útil para resolver las integrales de Feynman con dos bucles puede encontrarse en [176, capítulo 9], así como en [144].
Otras referencias que pueden ser de utilidad son [36, 26].

Apéndice F

El modelo de dos temperaturas: Campo medio y simulación Monte Carlo.

En este apéndice analizamos la relación entre dos modelos distintos con temperaturas compitiendo: el modelo tipo Ginzburg-Landau, introducido en el capítulo 5, y el modelo de Ising con dos temperaturas.

Parámetros del modelo tipo Ginzburg-Landau.
A lo largo del capítulo 5 consideramos que la única dependencia del modelo en la temperatura viene dada a través de las masas: μ_i^2, $i = 1, 2$. Supongamos ahora, que derivamos los hamiltonianos (5.1), para $i = 1, 2$, que aparecen en la definición del modelo, a partir de un modelo de Ising. Para ello seguimos el desarrollo de Amit [6, capítulo 2]. Este consiste, en aplicar una transformación gaussiana a la función de partición del modelo de Ising de equilibrio, y desarrollar las nuevas variables campo que aparecen, así como sus coeficientes, en series de potencias. De este modo se obtine un hamiltoniano tipo Ginzburg-Landau en el que los coeficientes de los términos cuadráticos vienen dados por vienen dados por:

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{T_0}{2T}\left(1 - \frac{T_0}{T}\right) \\ a_2 &= \frac{T_0}{2T}\left(\frac{2T_0}{T} - 1\right) \end{aligned} \tag{F.1}$$

siendo a_1 el coeficiente del término de masa, y a_2 el del término de gradiente, y T_0 la temperatura crítica en campo medio (capítulo 1). Si consideramos que cada uno de los hamiltonianos de tipo Ginzburg-Landau que aparecen en nuestro modelo tiene coeficientes con esta estructura, en el lagrangiano

final (5.18) se tiene,

$$b_1 = \frac{1}{2}\left[p\frac{T_0}{T_1}\left(1-\frac{T_0}{T_1}\right)+(1-p)\frac{T_0}{T_2}\left(1-\frac{T_0}{T_2}\right)\right] \tag{F.2}$$

$$b_2 = \frac{1}{2}\left[p\frac{T_0}{T_1}\left(2\frac{T_0}{T_1}-1\right)+(1-p)\frac{T_0}{T_2}\left(2\frac{T_0}{T_2}-1\right)\right] \tag{F.3}$$

donde $b_1 + \underline{q}^2 b_2$ es el coeficiente de $\underline{\Phi\Psi}$. (F.2) permite relacionar la masa crítica con las temperaturas críticas; así, fijada T_1,

$$\beta_{2,crit} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{(1+\frac{4p\beta_1(1-\beta_1)}{(1-p)}} \tag{F.4}$$

con $\beta_i = T_0/T_i$, de donde

$$\beta_1 \propto (T_2 - T_{2,crit}) + \Theta((T_2 - T_{2,crit})^2) \tag{F.5}$$

que justifica el que hayamos considerado $\mu_i^2 \propto T_i - T_{i,crit}$.
El coeficiente b_2, puede hacerse igual a 1, redefiniendo la escala espacial, por lo que la teoría con $b_2 = 1$ puede considerarse una teoría con *alcance efectivo* [99].
Del mismo que puede ocurrir que el coeficiente de $\underline{\Phi}^3\underline{\Psi}$ en el lagrangiano se anule, es posible también que el coeficiente b_2 sea igual a cero. Mientras que la primera condición señala la aparición de un punto tricrítico [1], esta segunda indica la presencia de otro tipo de inestabilidad: un *punto de Lifshitz* [75, 106].
Vemos por tanto, que en una construcción microscópica de nuestro modelo, la dependencia en las temperaturas no es trivial, pudiendo dar lugar a diferentes fenómenos, como puntos tricríticos, de Lifshitz, o alcances efectivos.
En lo que sigue vamos a estudiar, bajo dos puntos de vista diferentes, sendos modelos relacionados con el del capítulo 5:

(a) Modelo de 2 temperaturas en campo medio.

(b) Simulación Monte Carlo de un modelo tipo Ising con 2 temperaturas.

De este modo mostramos otras posibles estrategias, diferentes a la teoría de campos para analizar modelos de no equilibrio. Al mismo tiempo, puesto que en ambos casos, las dependencias con la temperatura aparecen de forma más clara que en el modelo tipo Ginzburg-Landau, trataremos de determinar si se mantiene la posibilidad de existencia de puntos tricríticos, predicha en el capítulo 5. Ambos tratamientos, nos permitirán constatar una vez más las fuertes dependencias de los estados estacionarios de no equillibrio en los

[1] Véase capítulo 5.

detalles de la dinámica microscópica.

El modelo de 2 temperaturas en campo medio.

Consideremos el modelo de Ising en campo medio, introducido en el primer capítulo. Llamemos N^+ y N^- al número de espines con valores $+1$ y -1 respectivamente, M a la magnetización total, y $m = M/N$ a la magnetización por espín. Se cumplen las relaciones

$$\left.\begin{array}{rcl} N &=& N^+ + N^- \\ M &=& N^+ - N^- \end{array}\right\} \quad \longrightarrow \quad \left\{\begin{array}{rcl} N^+ &=& \dfrac{N+M}{2} \\ N^- &=& \dfrac{N-M}{2} \end{array}\right. \tag{F.6}$$

Consideremos las siguientes probabilidades de transición que definen una dinámica de inversión de un espín en campo medio

$$W(M \to M \pm 2) = pw_1(M \to M \pm 2) + (1-p)w_2(M \to M \pm 2), \; p \in [0,1] \tag{F.7}$$

con

$$w_i(M \to M \pm 2) = N^{\pm} D(\mp 2\beta_i J d m) \; , \qquad i = 1,2. \tag{F.8}$$

donde $D[\lambda]$ satisface la condición de balance detallado respecto al hamiltoniano de Ising en campo medio, $H(m) = -\frac{1}{2}dJNm^2$. De este modo, es directo comprobar que en los límites $p = 1$ y $p = 0$, la solución estacionaria de la ecuación maestra construida con las probabilidades de transición anteriores viene dada por la medida de Gibbs siguiente

$$P_{est}(m) = \left(\begin{array}{c} N \\ N^+ \end{array} \right) \exp\left(\frac{N}{2}\beta_i J d m^2\right) \tag{F.9}$$

con $i = 1,2$ respectivamente.

Queremos estudiar los estados estacionarios de este modelo en el límite en que las fluctuaciones son completamente eliminadas.

Para ello consideramos la ecuación de evolución determinista asociada, obtenida al hacer $N \to \infty$,

$$\dot{M}(t) = 2p\left[w_1(M \to M+1) - w_1(M \to M-1)\right] \tag{F.10}$$

$$+2(1-p)\left[w_2(M \to M+1) - w_2(M \to M-1))\right]. \tag{F.11}$$

Consideramos dos realizaciones particulares de la función $D[\lambda]$: las dinámicas de Glauber y la de van Beijeren-Schulmman (V.B.S.).

Dinámica de Glauber.

Sea $D[\lambda] = 1 - \tanh(\lambda/2)$, (1.11). La ecuación (F.11), se reduce a:

$$\dot{m}(t) = F_{Gl}(m) \equiv 2\left[p\tanh(dJ\beta_1 m) + (1-p)\tanh(dJ\beta_2 m) - m\right] \tag{F.12}$$

y $F_{Gl}(m)$ puede derivarse de un potencial, tal que $F_{GL} = -dU_{GL}(m)/dm$, siendo

$$U_{Gl} = -2\left[\frac{p}{dJ\beta_1}\log\cosh(dJ\beta_1) + \frac{(1-p)}{dJ\beta_2}\log\cosh(dJ\beta 2) - \frac{1}{2}m^2\right]. \quad \text{(F.13)}$$

Las soluciones deterministas estacionarias vienen dadas por los extremos de $U_{Gl}(m)$. En la figura (F) representamos la magnetización frente a la temperatura T_1 para un valor fijo de T_2 y distintos valores de p. La curva con $p = 1$

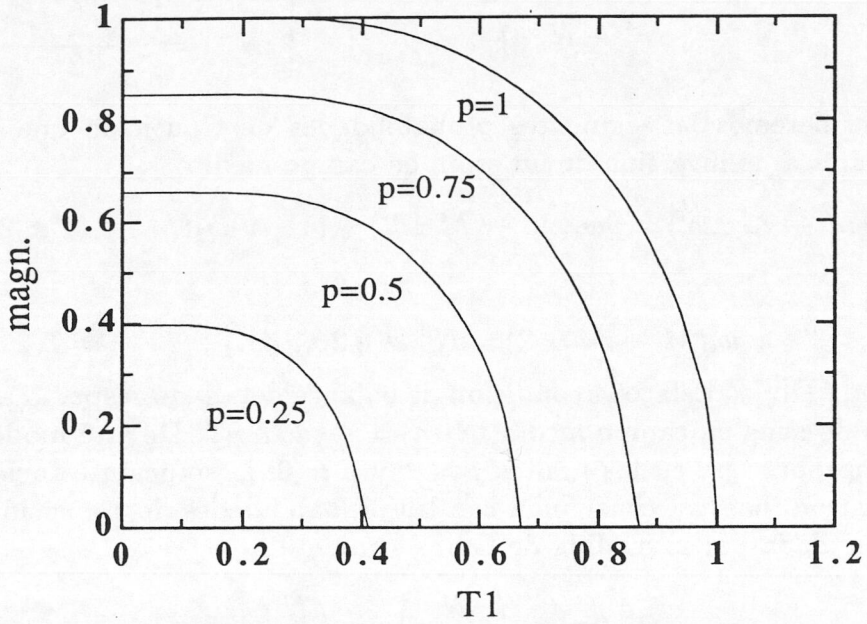


Figura F.1: Curvas de magnetización para la dinámica de Glauber con $T_2 = 2$, $dJ = 1$ y diferentes valores de p

corresponde a la solución de equilibrio (1.5). Al disminuir p, esto es, aumentar el grado de competición respecto al caso puro $p = 1$ hay que enfriar más el sistema para alcanzar el cambio de fase, pues $T_2 = 2$ está por encima de la temperatura crítica de equilibrio. El cambio de fase se produce allí donde cambia la curvatura del potencial en el origen. En dicho punto la solución $m = 0$ pierde la estabilidad local, y corresponde al punto donde se anula el coeficiente cuadrático de U_{Gl} en un desarrollo en potencias de m,

$$T_1^{crit} = \frac{pT_2}{T_2 + p - 1} \quad \text{(F.14)}$$

que tiende a 0(1) cuando p tiende a 0(1). Es también destacable el hecho de que aun a temperatura $T_1 = 0$ no se tiene saturación, $m = 1$.

Dinámica de V.B.S.

Sea $D[\lambda] = \exp(-\lambda/2)$, (1.13). Para esta función la ecuación determinista, (F.11), queda

$$\dot{m}(t) = F_{VBS}(m) \equiv 2\Big[p\sinh(dJ\beta_1 m) + (1-p)\sinh(dJ\beta_2 m) \\ -pm\cosh(dJ\beta_1 m) - (1-p)m\cosh(dJ\beta_2 m)\Big] \tag{F.15}$$

y el potencial del que se deriva F_{VBS} es

$$U_{VBS}(m) = \\ 2\Big[p\left(\frac{1}{dJ\beta_1}m\sinh(dJ\beta_1 m) - \left(\frac{1}{(dJ\beta_1)} + \frac{1}{(dJ\beta_1)^2}\right)\cosh(dJ\beta_1)\right) \\ +(1-p)\left(\frac{1}{dJ\beta_2}m\sinh(dJ\beta_2 m) - \left(\frac{1}{(dJ\beta_2)} + \frac{1}{(dJ\beta_2)^2}\right)\cosh(dJ\beta_2)\right)\Big]. \tag{F.16}$$

Para cada valor de p y T_2 la temperatura crítica para el cambio de fase coincide con (F.14); sin embargo, a diferencia del caso anterior ahora las curvas de magnetización saturan a temperatura $T_1 = 0$ como puede verse en la figura (F).

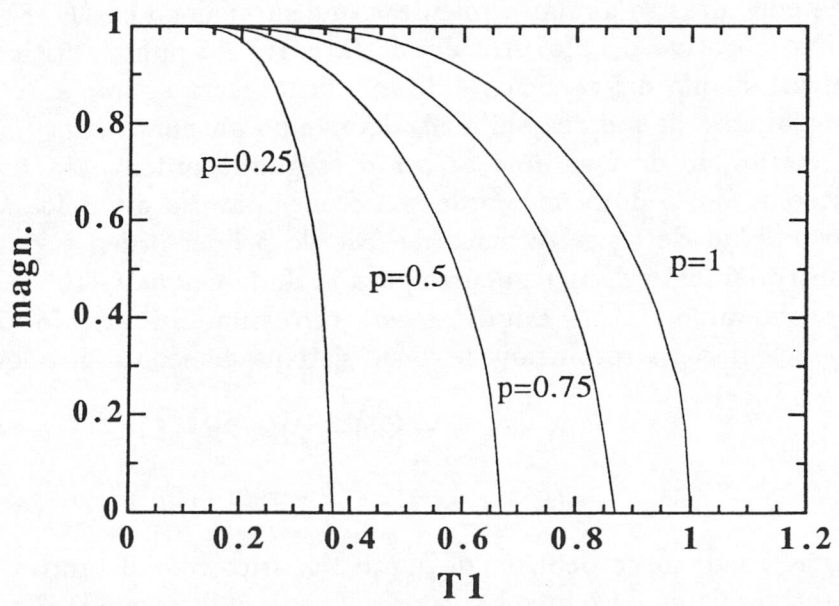


Figura F.2: Curvas de magnetización para la dinámica de van Beijeren- Schulmann con $T_2 = 2$, $dJ = 1$ y diferentes valores de p

Puntos tricríticos.

Existe un aspecto que diferencia claramente las dos dinámicas anteriores

y que vamos a estudiar separadamente; para ello escribimos los primeros términos del desarrollo en series de potencias de los dos potenciales deterministas,

$$U_{GL} = (1 - p\alpha_1 - (1-p)\alpha_2)m^2 + \frac{1}{6}(p\alpha_1^3 + (1-p)\alpha_2^3)m^4 + \Theta(m^6) \quad \text{(F.17)}$$

y

$$U_{VBS} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{m^{2n}}{(2n)!}\left[p\alpha_1^{2(n-1)}(2n-1-\alpha_1) + (1-p)\alpha_2^{2(n-1)}(2n-1-\alpha_2)\right]$$
$$= -(p\alpha_1 + (1-p)\alpha_2)m^2 + \frac{1}{24}\left[p\alpha_1^2(3-\alpha_1) + (1-p)\alpha_2^2(3-\alpha_2)\right]m^4 + \Theta(m^6) \quad \text{(F.18)}$$

donde hemos definido $\alpha_i = dJ\beta_i$, con $i = 1, 2$.
Puesto que el coeficiente del término cuadrático se anula en los mismos puntos para ambas dinámicas, ambas tienen, en principio, una misma estructura de puntos críticos. Nótese, sin embargo, que los términos cuárticos y siguientes no coinciden en ambos desarrollos. En particular, el coeficiente asociado a m^4 en (F.17) es siempre definido positivo (nulo cuando ambas temperaturas se anulan), mientras que su análogo en (F.18) puede ser positivo, negativo o nulo. Allí donde la curva de puntos críticos coincide con un valor nulo del coeficiente de m^4 dicha curva se une a la curva límite de un dominio de metaestabilidad, definiendo un *punto tricrítico* [2]; a partir de él el cambio de fase deja de ser de segundo orden para transformarse en discontínuo, o de primer orden. Así pues para la dinámica V.B.S. existe la posibilidad de tener cambios de fase de primer orden y puntos tricríticos, contrariamente a lo que ocurre para la dinámica de Glauber.
Consideramos (F.18) e igualamos a cero simultáneamente los dos primeros coeficientes. La resolución de dicho sistema de ecuaciones lleva a:

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= 1 - \left[2(1-p)^2 p(2p-1)\right]^{1/3} \\ \alpha_2 &= 1 - \left[2p^2(1-p)(1-2p)\right]^{1/3}. \end{aligned} \quad \text{(F.19)}$$

Estas condiciones definen un punto tricrítico sólo si tanto α_1 como α_2 son positivos, lo cual excluye los valores de p en el intervalo $]1/3, 2/3[$ (nótese que $\alpha_1 = 0$ corresponde a $p = 1/3$ y $\alpha_2 = 0$ a $p = 2/3$). En la figura (F) se muestra la curva de puntos tricríticos solución de (F.19) (curva uniparámetrica con parámetro p) y $dJ = 1$. Fijado un valor de p, por ejemplo $p = 0.2$, se tiene una curva de cambios de fase como la de la figura (F). La línea de trazo

[2] Vease [81, apéndice 5], o [98].

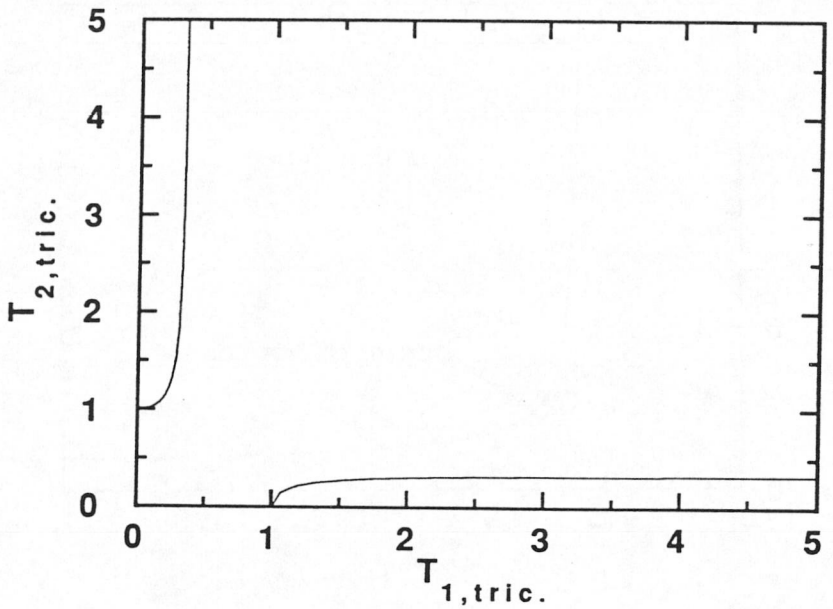


Figura F.3: Curva de puntos tricríticos para la dinámica de V.B.S.

contínuo representa las curva de cambios de fase. Está dividida en dos por el punto tricrítico: a su derecha las transiciones son de segundo orden y a su izquierda de primer orden. Esta línea señala la aparición de extremos absolutos no triviales en el potencial. La línea punteada, que se une a la anterior en el punto tricrítico, y puede prolongarse sobre la de cambios de fase de segundo orden se obtiene anulando el coeficiente de m^2.

Indica un cambio de convexidad del potencial en el origen. Por último, la curva de puntos y rayas señala la aparición de estados metaestables, mínimos relativos pero no absolutos del potencial, para valores no nulos de m. Llamemos T_1^* al valor de la temperatura al que asintóticamente tiende la curva crítica (véase figura (F)). Para valores $T_1 < T_1^*$ el sistema no presenta cambio de fase. En la figura (F) se representa una curva de magnetización típica para un valor fijo de T_1 entre T_1^* y la temperatura tricrítica. Por debajo de un cierto valor crítico de T_2 aparece bruscamente una solución de magnetización no nula, y en un amplio rango de valores de T_2 coexisten distintas soluciones estables y metaestables. Para ese mismo valor, $T_1 = 0.25$, en la figura (F) se muestra la forma del potencial en función de T_2. Para $T_2 = 1$ el sistema está ordenado y el potencial presenta un mínimo absoluto cerca de $m = 1$. Al aumentar T_2 la profundidad del minimo va decreciendo, hasta que pasado un cierto valor crítico deja de ser un extremo absoluto y pasa a corresponder a un estado metaestable. Si seguimos aumentando T_2 el mínimo desaparece. En la figura (F) se muestra la magnetización para $T_1 = 0.22$, ligeramente mayor que T_1^* (véase figura (F)). Ahora la solución

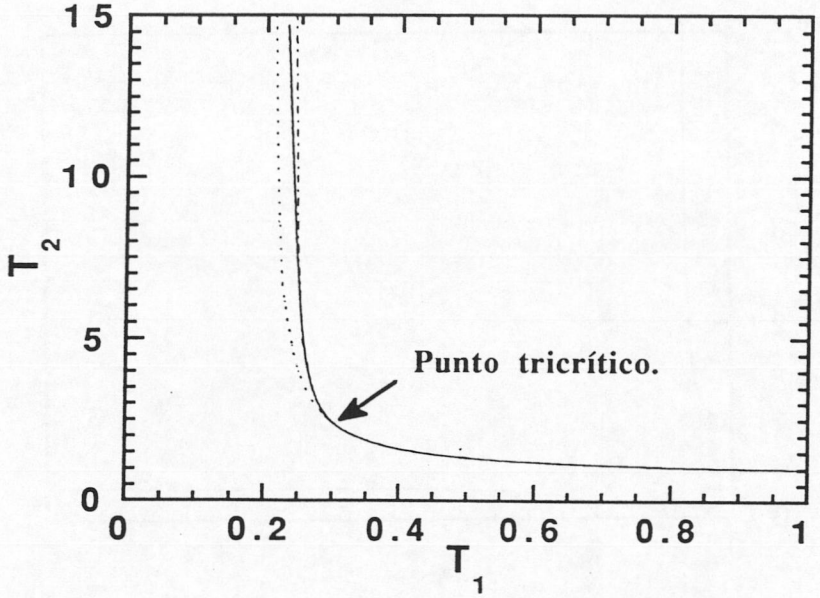


Figura F.4: Curva de puntos críticos (linea contínua) para la dinámica de V.B.S., $p = 0.2$ y $dJ = 1$. Vease explicación en el texto.

$m = 0$ es en cualquier caso metaestable y aparece cuando T_2 cruza la línea en que el segundo coeficiente en (F.18) se anula. Así, para cualquier valor de T_2 se tiene una magnetización no nula. En la siguiente figura (F) se ilustra el comportamiento del potencial al variar T_2. Se observa claramente la naturaleza metaestable del origen, incluso para valores muy elevados de T_2.

En resumen:

para la dinámica de V.B.S. encontramos una compleja estructura del diagrama de las fases, que incluye estados metaestables, cambios de fase de primer y segundo orden y puntos tricríticos. Sin embargo, su análogo para la otra dinámica considerada es mucho más simple, y sólo aparecen cambios de fase de segundo orden. Por lo que la forma de la dinámica, función $D[\lambda]$ es esencial para determinar la estructura del diagrama de las fases del modelo de no equilibrio, aun en el caso más sencillo de la aproximación de campo medio.

Dinámica con incrementos de energía libre.

Para ahondar un poco más en las sutilezas del no equilibrio, vamos a considerar, antes de finalizar con el modelo de dos temperaturas en campo medio, otro tipo de dinámica. En ella vamos a considerar el mismo tipo de funciones $D[\lambda]$ de los apartados anteriores, esto es (1.11) y (1.13) pero con un mecanismo dinámico diferente, que no depende de incrementos de energía, sino de incrementos de energía libre. Para ello escribimos la distribución estacionaria

de equilibrio para cada temperatura, T_i, dada por (F.9) como:

$$P_{est}(m) = \exp(-\beta_i F_i(m)) \tag{F.20}$$

siendo $F_i(m)$ la energía libre de Gibbs para cada temperatura, definida por

$$F_i(m) = \frac{N}{2} J d m^2 + \frac{N}{\beta_i}\left[\frac{1+m}{2}\log\left(\frac{1+m}{2}\right) + \frac{1-m}{2}\log\left(\frac{1-m}{2}\right)\right]. \tag{F.21}$$

donde hemos hecho uso de la aproximación de Stirling. De este modo el cambio de energía libre asociado a la inversión de un espín, para cada mecanismo de equilibrio, es:

$$\Delta F_i(m) = \pm 1 \frac{1}{\beta_i}\left[-2\beta_i J d m + arctanh(m)\right] \tag{F.22}$$

donde hemos usado que

$$arctanh(x) = \frac{1}{2}\log\left(\frac{1+x}{1-x}\right), \qquad |x| < 1. \tag{F.23}$$

Si sustituimos las probabilidades de transición de equilibrio dadas por (F.8), por

$$w_i(M \to M \pm 2) = D(\beta_i \Delta F_i(m)) \tag{F.24}$$

se tiene una serie de mecanismos dinámicos cada uno de los cuales lleva al sistema a un estado de equilibrio diferente. Es directo comprobar que, cuando un único mecanismo actúa, la dinámica con incrementos de energía libre lleva al mismo estado estacionario de equilibrio que la dinámica con incrementos de energía. Sin embargo, fuera del equilibrio esto no es cierto en general. De hecho es sencillo demostrar que únicamente para la dinámica de V.B.S., (1.13), ambos mecanismos llevan al mismo estado estacionario fuera del equilibrio. Por ejemplo, con este tipo de mecanismo dinámico y $D[\lambda] = 1 - \tanh(\lambda/2)$ el potencial determinista asociado es diferente de (F.13) tanto cualitativa como cuantitativamente: el coficiente cuártico de su desarrollo en series de potencias puede anularse, contrariamente a lo que ocurría para (F.17), aunque los puntos tricríticos asociados corresponden a valores no físicos de los parámetros.

Así, volvemos a obtener como principal resultado que en situaciones fuera del equilibrio el estado estacionario es enormemente sensible a cualquier ligera modificación del mecanismo dinámico que lo define.

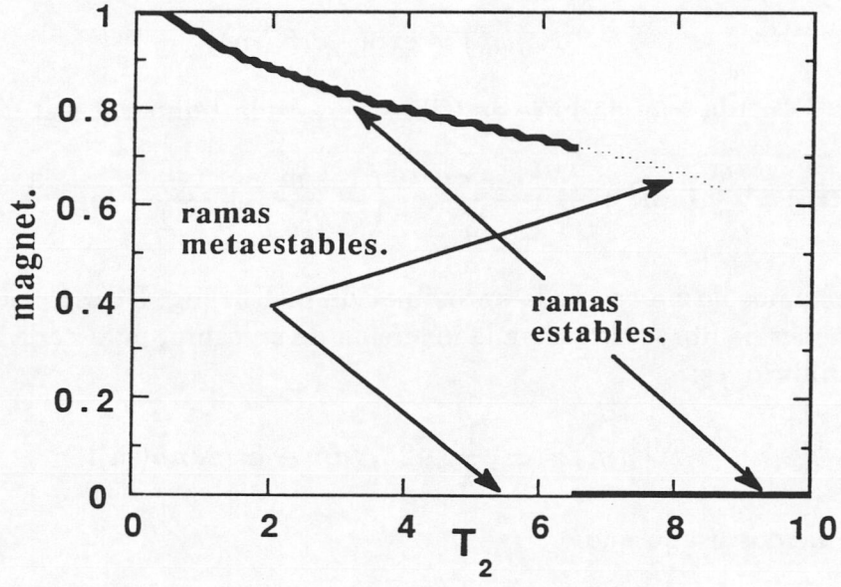


Figura F.5: Valores posibles de la magnetización para $T_1 = 0.25$. se observa la presencia de metaestabilidades, así como un cambio de fase de primer orden en $T_1 \approx 6.5$.

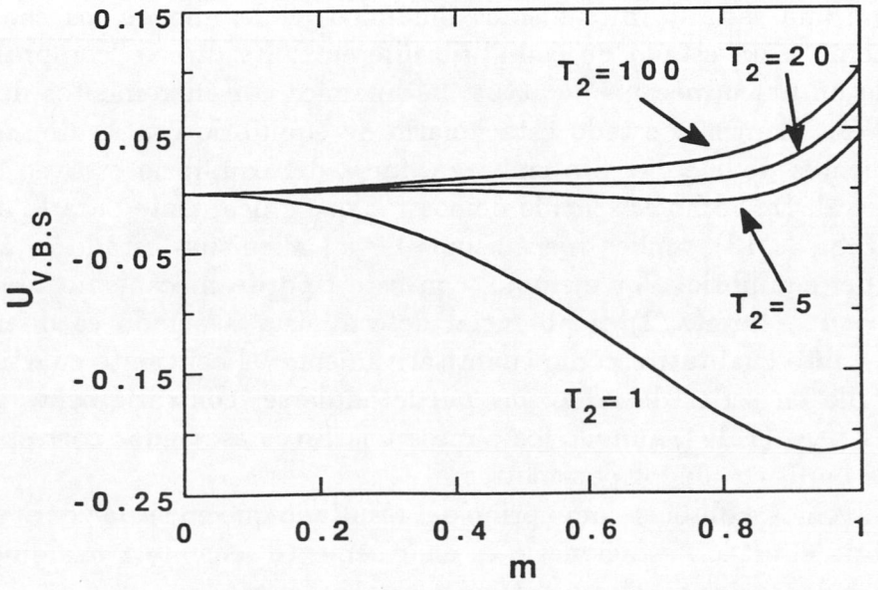


Figura F.6: Perfiles del potencial para distintos valores de T_2 con $T_1 = 0.25$.

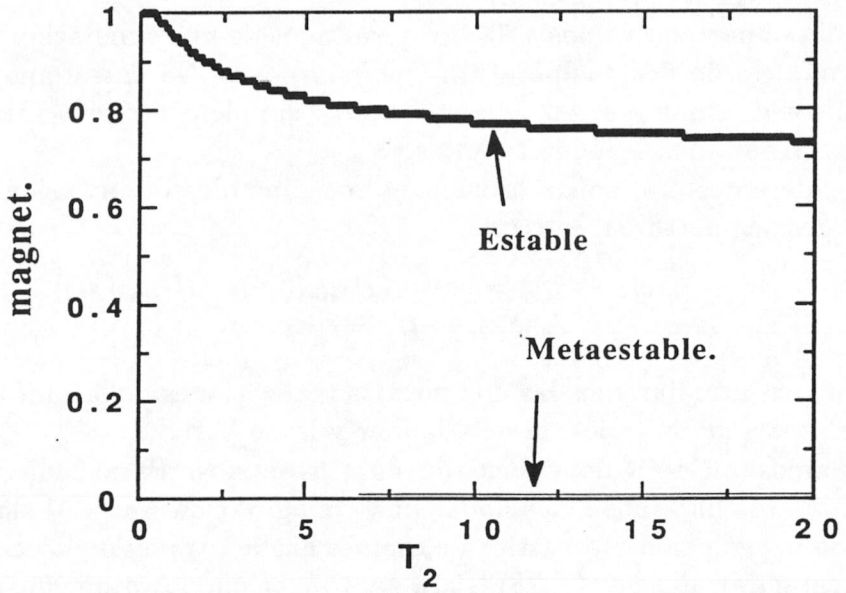


Figura F.7: Valores posibles de la magnetización para $T_1 = 0.22$ fijo, y distintos valores de T_2. Se muestran las ramas estable y metaestable.

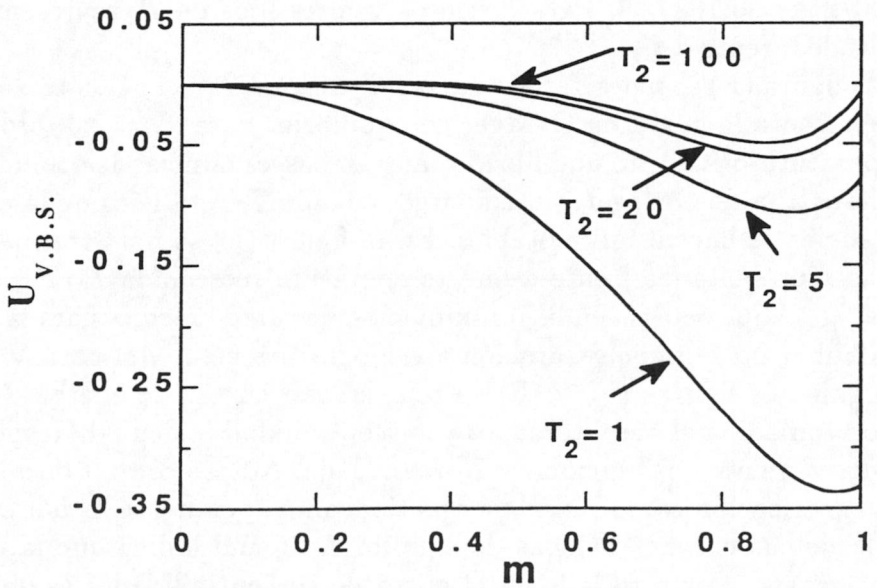


Figura F.8: Perfiles del potencial para distintos valores de T_2 con $T_1 = 0.22$.

Simulación Monte Carlo.

En este apartado vamos a dar los resultados de una simulación Monte Carlo del modelo de dos temperaturas bidimensional. No entraremos en detalles técnicos de como realizar la simulación, y simplemente presentamos algunos de los resultados más interesantes.

Consideramos el modelo de Ising, y una dinámica de inversión de un espín con dos temperturas, esto es

$$w(\underline{s} \to \underline{s}^x) = pD[\beta_1(H_{Ising}(\underline{s}^x) - H_{Ising}(\underline{s}))] \\ +(1-p)D[\beta_2(H_{Ising}(\underline{s}^x) - H_{Ising}(\underline{s}))]. \qquad \text{(F.25)}$$

De nuevo estudiaremos las dos mismas realizaciones de la función $D[\lambda]$, que en el apartado anterior: la de Glauber y la de V.B.S..

Tomamos un retículo cúbico de $64 * 64$ nudos. Para cada valor de los parámetros hacemos evolucionar una configuración inicial dada, implementando la evolución estocástica de espines hasta a través de la ecuación Maestra caracterizada por (F.25). Para garantizar que los promedios estadísticos que calculemos son estacionarios tomamos entre 250.000 y 500.000 pasos Monte Carlo, y no tenemos en cuenta los primeros 50.000 ó 100.000, durante los cuales el sistema aún no ha relajado hasta su estado estacionario.

Resultados.

Presentamos los resultados obtenidos para un valor típico de p ($p = 50000/2^{16} = 0.7629...$). Para distintos valores fijos de T_1 representamos los resultados frente a T_2.

En las figura (F) se muestran las curvas de magnetización. Con trazo contínuo se representa la curva de Onsager de equilibrio. Para $T_1 = 2.3$, próxima a la temperatura crítica de equilibrio, para ambas dinámicas las soluciones son similares a la de Onsager. sin embargo, cuando T_1 está lejos de la crítica, las diferencias se hacen muy notables. En la figura (F) se muestran las mismas curvas representadas frente a una temperatura reescalada $T_2/T_{2,crit}$. Nótese que al igual que ocurría en la aproximación de campo medio, para la dinámica de Glauber no se tiene saturación a temperatura cero, y sí para V.B.S.. En las siguientes figuras (F) y (F) se representan curvas de energía (calculada como promedio del hamiltoniano) y susceptibilidad (calculada respecto a T_2) respectivamente, en función de T_2 reescalada. Nótese como tanto las curvas de magnetización como las de energía tienen una pendiente menor en modulo que la de sus curvas análogas de equilibrio, lo cual indica que la transición es más suave. Por otro lado en la curva de susceptibilidades se observa que cuando T_1 es menor, el pico es menos alto y redondeado, que indica también que la transición no es tan abrupta.

No hemos realizado un estudio de tamaño finito [16] para estudiar la criticalidad del modelo. Simulaciones mucho más sistemáticas de otros autores pare-

cen indicar que el modelo pertenece a la clase de universalidad del modelo de Ising de equilibrio [3], confirmando también nuestra predicción de teoría de campos. Una diferencia notable con la aproximación de campo medio es que ahora no detectamos puntos tricríticos ni cambios de fase de primer orden. Esto es consecuencia de que el papel que desempeñan las fluctuaciones en este sistema bidimensional es muy importante, y despreciarlas por completo, como se hace en campo medio, no es una buena aproximación. Así pues, la simulación refleja diferencias tanto cualitativas como cuantitativas entre las dos dinámicas consideradas, así como respecto a sus aproximaciones de campo medio.

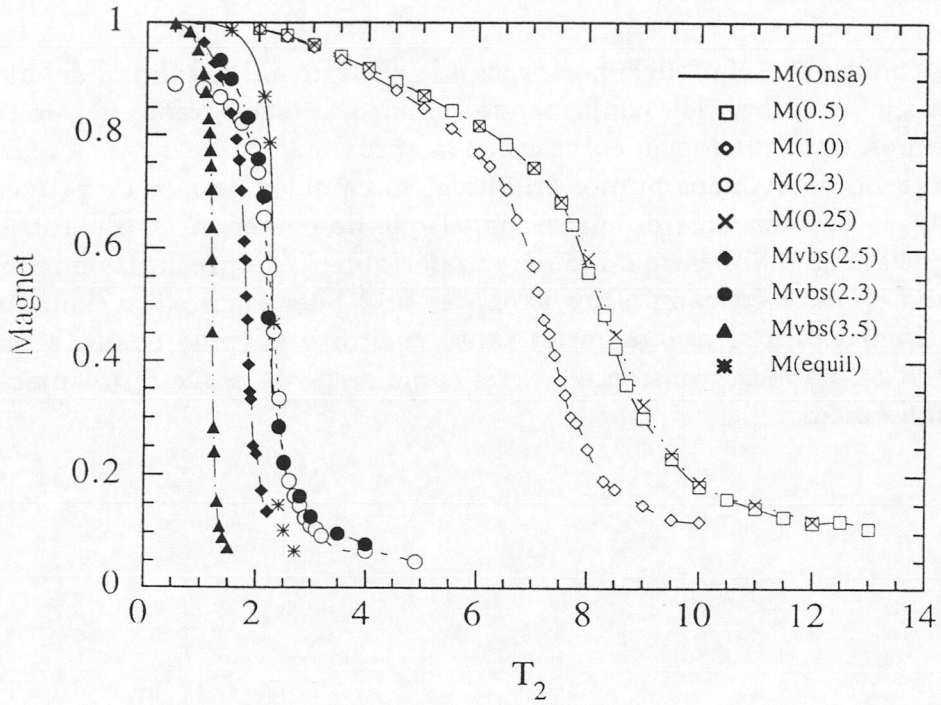


Figura F.9: Curvas de magnetización frente a T_2, con $p = 0.76....$ El número entre paréntesis indica la temperatura T_1. Mvbs corresponde a la dinámica V.B.S. y M a la de Glauber. M(equil) se obtiene tomando $p = 1$.

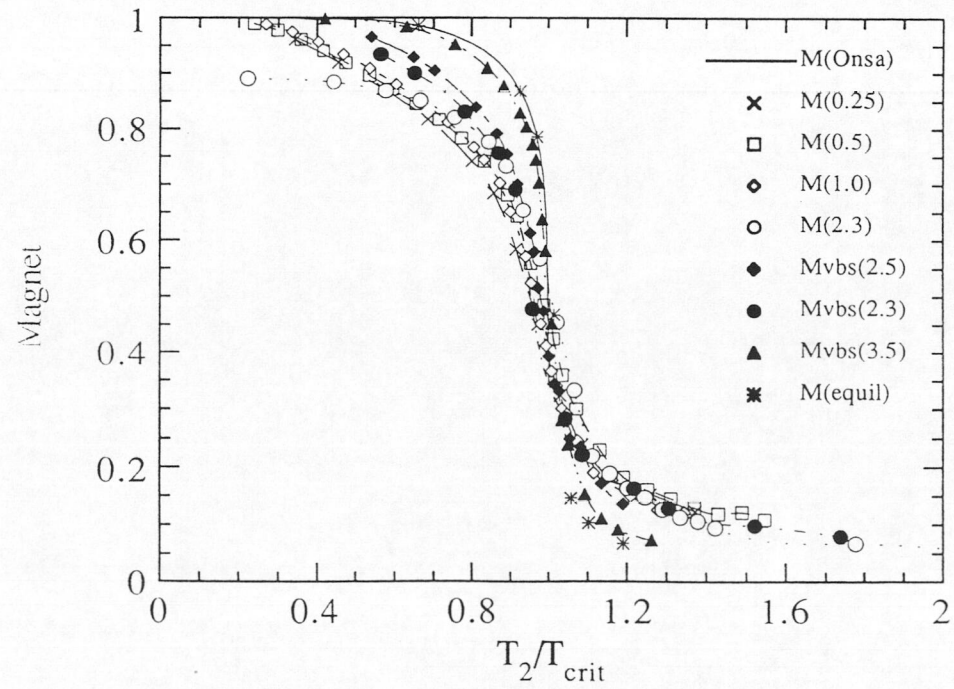


Figura F.10: Curvas de magnetización reescaladas.

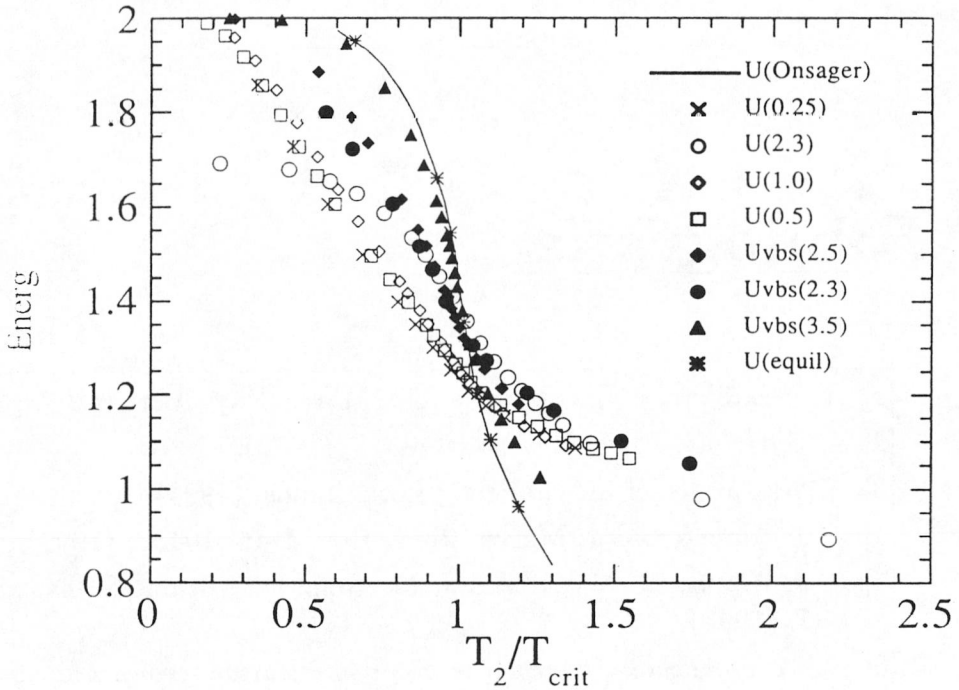


Figura F.11: Curvas de energía para $p = 0.76...$, en función de T_2 reescalada.

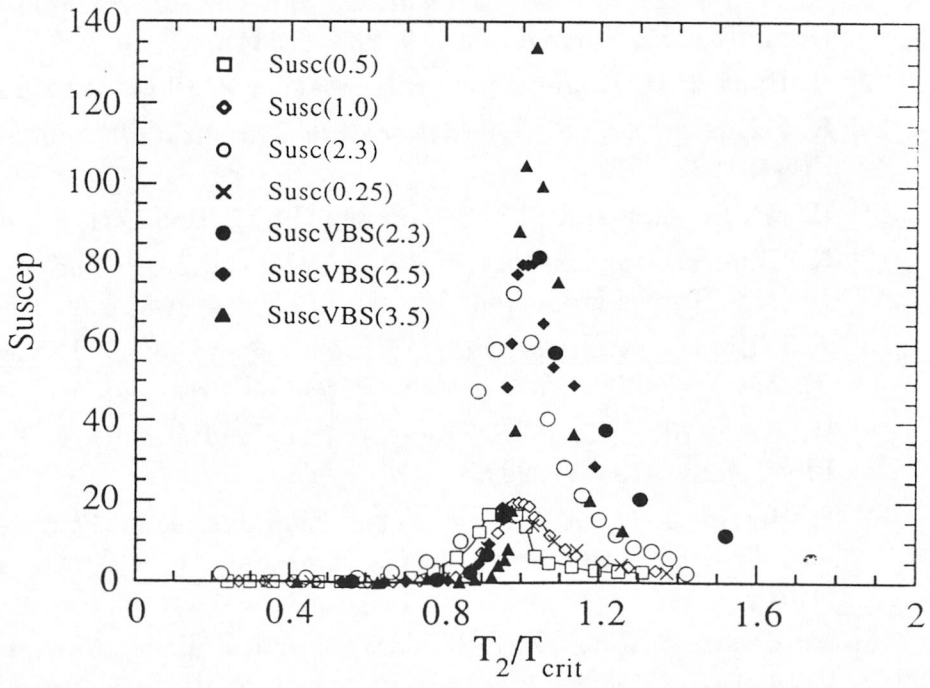


Figura F.12: Curvas de susceptibilidad para $p = 0.76...$ y T_2 reescalada.

Bibliografía

[1] A. Achahbar, P. L. Garrido and J. Marro, Phys. Lett. **A172**, 29, (1992).

[2] A. Aharony, Phys. Rev. **B18**, 3318, (1978).

[3] F. Alexander et al. PrePrint, Los Alamos, (1994).

[4] J. J. Alonso and J. Marro, Phys. Rev. **B45**, 10408, (1992).

[5] J. J. Alonso, J. Marro and J. M. Gonz lez Miranda, Phys. Rev. **E47**, 885, (1993).

[6] D. Amit, *Field Theory, the Renormalization group and critical phenomena*, World Scientific, 1984.

[7] V. I. Arnold *Mecánica Clásica*, Paraninfo, Madrid, 1983.

[8] G. A. Baker, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Ed. C. Domb and M. S. Green, Vol. 9, 233, (1984).

[9] R. Bausch, H. K. Janssen and H. Wagner Z. Phys. **B24**, 113, (1976).

[10] R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academic Press, 1982.

[11] H. van Beijeren and L. S. Schulmann, Phys. Rev. Lett. **53**, 806, (1984).

[12] K. Binder, *Applications of the Monte Carlo Method in Statistical Physics*, Topics in Current Physics 36, Springer-Verlag, 19??.

[13] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher and M. E. J. Newman, *The Theory of Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford, 1992.

[14] H. W. J. Blöte, J. R. Heringa, A. Hoogland and R. K. P. Zia, Jour. Phys. **A23**, 3799, (1990).

[15] E. Brezin, J. C. Le Guillou and J. Zinn-Justin, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Ed. C. Domb and M. S. Green, Vol. 6, 125, (1976).

[16] *Finite-size Scaling*, Ed. J. L. Cardy, North Holland, Amsterdam, 1988.

[17] S. Chaturvedi, C. W. Gardiner and D. F. Walls, Phys. Lett. **A57**, 404,, (1976).

[18] K. c. Chou, Z. b. Su, B. l. Hao, and L. Yu, Phys. Rev. **118**, 1, (1985).

[19] S. Coleman and E. Weinberg, Phys. Rev. **D7**, 1888, (1973).

[20] R. F. Dashen, B. Hasslacher and A. Neveu, Phys. Rev. **D10**, 4114, (1974); Phys. Rev. **D10**, 4130, (1974).

[21] P. G. de Gennes, Phys. Lett. **A38**, 339, (1972).

[22] U. Deker, Z. Phys. **B31**, 283, (1978).

[23] U. Deker and F. Haake, Z. Phys. **B35**, 281, (1979).

[24] U. Deker and F. Haake, Z. Phys. **B36**, 379, (1980).

[25] H. Dekker, Phys. Rev. **A19**, 2102, (1979).

[26] A. Devoto and D. W. Duke, Nuovo Cimento **7**, 1, (1984)

[27] R. Dickman, Phys. Rev. **A34**, 4246, (1986).

[28] R. Dickman, Phys. Lett. **A122**, 463, (1987).

[29] C. De Dominicis and L. Peliti, Phys. Rev. **B18**, 353, (1978).

[30] C. De Dominicis, E. Brezin and J. Zinn-Justin, Phys. Rev. **B12**, 4945, (1975).

[31] A. N. Drozdov, Physica **A187**, 329, (1992).

[32] L. Elsgoltz, *Differential Equations and the Calculus of Variations*, Mir, Moscu, 1977.

[33] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, N.Y., 1965.

[34] D. Forster, D. R. Nelson and M. J. Stephen, Phys. Rev. **A16**, 732, (1977).

[35] M. I. Freidlin and A. D. Ventsel, *Random Perturbations of Dynamical Sistems*, Springer, New York, 1984.

[36] J. Fujimoto, M. Igarashi, N. Nakazawa, Y. Shimizu and K. Tobimatsu, Prog. Theor. Phys. **100**, 333, (1990).

[37] R. Fukuda and M. Zumino, Phys. Rev. **A44**, 6252, (1991).

[38] G. Gallavotti, *The Elements of Mechanics*, Springer-Verlag, New York, 1983.

[39] H. Gang, Phys. Rev. **A39**, 3693, (1988): Phys. Rev. **A39**, 1286, (1989).

[40] H. Gang and Z. Ren-rong, Phys. Rev. **A44**, 2450, (1991).

[41] C. W. Gardiner and S. Chaturvedi, J. Stat. Phys. , 429, (1977).

[42] P. L. Garrido and J. Marro, Phys. Rev. Lett. **62**, 1929, (1989).

[43] P. L. Garrido and J. Marro, Jour. Phys. **A25**, 1453, (1992).

[44] P. L. Garrido and M. A. Muñoz, Phys. Rev. **E48**, R4153, (1993).

[45] P. L. Garrido and J. Marro, Europhys. Lett. **15**, 375, (1991).

[46] P. L. Garrido, A. Labarta and J. Marro, J. Stat. Phys. **49**, 551, (1987).

[47] P. L. Garrido and M. A. Muñoz, *Continuum description for nonequilibrium competing dynamic models*, submitted to Phys. Rev. Lett.

[48] I. M. Gelfand and A. M. Yaglom, J. Math. Phys. 1, 48, (1960).

[49] J. L. Gervais and A. Jevicki, Nucl. Phys. **B110** , 93, (1976).

[50] P. Glansdorff and I. Prigogine, Physica **20**, 773, (1954); Physica **30**, 351, (1964); Physica **46**, 344, (1970).

[51] R. J. Glauber, J. Math. Phys. **4**, 294, (1963).

[52] J. M. Gonz lez-Miranda, P. L. Garrido, J. Marro and J. L. Lebowitz, Phys. Rev. Lett. **59**, 1934, (1987).

[53] H. Grabert, P. Hanggi and I. Oppenheim, Physica **A117**, 300, (1983).

[54] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series and Products*, Academic Press, 1980.

[55] R. Graham Phys. Rev. Lett. **38**, 51, (1977).

[56] R. Graham, in *Stochastic Processes in Nonequilibrium systems*, Vol. 84 of Lecture Notes in Physics, Eds. L. Garrido et al., Springer, New York, (1978).

[57] R. Graham, J. Stat. Phys. **35**, 729, (1984); J. Stat. Phys. **37**, 709, (1984).

[58] R. Graham and T. Tel Phys. Rev. **A31**, 1109, (1985).

[59] R. Graham, D. Roekaerts and T.Tel, Phys. Rev. **A31**, 3364, (1985).

[60] R. Graham and T. Tel, Phys. Rev. **A33**, 1322, (1986).

[61] G. Grinstein, C. Jayaprakash and Y. He, Phys. Rev. Lett. **55**, 2527, (1985).

[62] G. Grinstein, Jour. Appl. Phys. **69**, 5441, (1991).

[63] G. Grinstein and A. Luther, Phys. Rev. **B13**, 1329, (1976).

[64] S. R. De Groot, and P. Mazur, *Nonequilibrium Thermodynamics*, Dover Publications, Inc. New York, 1964.

[65] H. Grosse, *Models in Statistical Physics and Quantum Field Theory*, Springer-Verlag, 1988.

[66] M. C. Gutwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*, Spriger-Verlag, New York, 1990.

[67] H. Haken, *Synergetics*, Springer-Verlag, 1977.

[68] B. I. Halperin and P. C. Hohenberg, Phys. Rev. **B10**, 139, (1974).

[69] P. Hanggi, Phys. Rev. **A25** 1130, (1982).

[70] P. Hanggi, H. Grabert, P. Talkner and H. Thomas, Phys. Rev. **A29** 371, (1984).

[71] P. Hanggi, P. Talkner and M. Borkovec, Rev. Mod. Phys. **62** 251, (1990).

[72] M. Henon, in *Chaotic Behaviour of Deterministic Systems*, Ed. G. Iooss, R. H. G. Helleman and R. Stora, XXXVI Les Houches session, North Holland, 1983.

[73] H. W. Hirsch and S. Smale, *Differential Equations, Dynamical Systems and Linnear Algebra*, Academic Press, New York, 1974.

[74] P. C. Hohenberg and B. J. Halperin, Rev. Mod. Phys. **49**, 435, (1977).

[75] R. M. Hornreich, M. Luban, and S. Shtrikman, Phys. Rev. Lett. **35**, 1678, (175)

[76] Wm. G. Hoover, *Molecular Dynamics*, in Lecture Notes in Physics, 258, 1987.

[77] J. O. Indekeu, A. Maritan and A. L. Stella, Jour. Phys. **A15**, L291, (1982).

[78] J. O. Indekeu, A. L. Stella and L. Zhang, Jour. Phys. **A17**, L341, (1984).

[79] E. Ising Z. Phys. **31**, 253, (1925).

[80] K. Ito, Mem. Amer. Mathem. Soc. **4**, 288, (1951).

[81] C. Itzykson and J. M. Drouffe, *Statistical Field Theory*, 2 volumes. Cambridge University Press, 1989.

[82] H. K. Janssen, Z. Phys. **B23**, 377, (1976).

[83] H. K. Janssen, in *Dynamical Critical Phenomena and Related Topics*, Lecture Notes in Physics 104, pg 25, Springer-Verlag, 1979.

[84] H. K. Janssen and B. Schmittmann, Z. Phys. **B64**, 503, (1986).

[85] H. R. Jauslin, Physica **A144**, 179, (1987).

[86] H. R. Jauslin, J. Stat. Phys. **42**, 573, (1986).

[87] H. R. Jauslin, in "*II Granada seminar in Computational Physics*, Ed. P. L. Garrido and J. Marro, World scientific, 1993.

[88] L. Kadanoff, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Ed. C. Domb and M. S. Green, Vol.5, 1, Academic Press, New York, 1978.

[89] N. G. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, North Holland, 1981.

[90] I. Kanter and D. S. Fisher, Phys. Rev. **A40**, 5327, (1989).

[91] K. Kawasaki, Phase Transitions and Critical Phenomena, Ed. Green and Domb, Vol.2, Academic Press, (1972).

[92] D. C. Khandekar and S. V. Lawande, Phys. Rep. **137**, 115, (1986).

[93] S. E. Koonin, *Computational Physics*, Benjamin, 1989.

[94] H. A. Kramers, Physica **7**, 284, (1940).

[95] H. J. Kreuzer, *Nonequilibrium Thermodynamics and its Statistical Foundation*, Oxford University Press, 1986.

[96] L. D. Landau, *Collected papers*, Pergamon, New york, 1965.

[97] F. Langouche, D. Roekaerts and E. Tirapegui, Phys. Rev. **D20**, 419, (1979); Phys. Rev. **D20**, 433, (1979); Jour. Phys. **A11**, L263, (1978); Jour. Phys. **A13**, 449, (1980), Nuov. Cim. **B53**, 135, (1979).

[98] I. D. Lawrie and S. Sarbach, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Ed. C. Domb and M. S. Green, Vol. **9**, 1, (1984).

[99] I. D. Lawrie, Jour. Phys. **A12**, 919, (1979).

[100] M. Le Bellac, *Quantum and Statistical Field Theory*, Clarendon Press, Oxford, 1991.

[101] J. L. Lebowitz and P. G. Bergmann, Ann. Phys. **1**, 1, (1957).

[102] W. Lenz, Z. Phys. **21**, 613, (1929); Z. Phys. **56**, 778, (1929).

[103] K. t. Leung and J. L. Cardy, J. Stat. Phys. **44**, 567, (1986).

[104] K. t. Leung, B. Schmittmann and R. K. P. Zia, Phys. Rev. Lett. **62**, 1772, (1989).

[105] K. t. Leung, Phys. Rev. Lett. **66**, 453, (1991).

[106] Y. Levin and K. A. Dawson, Phys. Rev. **A42**, 1976, (1990).

[107] A. L. Lewis, Phys. Rev. **B18**, 5091, (1978).

[108] A. L. Lewis amd F. W. Adams, Phys. Rev. **B18**, 5099, (1978).

[109] A. I. Lopez-Lacomba, P. L. Garrido and J.Marro, Jour. Phys. **A23**, 3809, (1990).

[110] T. C. Lubensky, Phys. Rev. **B11**, 3573, (1975).

[111] S. K. Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena*, Benjamin, 1976.

[112] J. Marro and R. Dickman, *Nonequilibrium Phase Transitions and Critical Phenomena in Lattice Systems*, To appear.

[113] J. Marro, P. L. Garrido and J. L. Vallés, Phase Transitions, **29**, 129, 1991.

[114] P.C. Martin, E. D. Siggia and H. A. Rose, Phys. Rev. **A8**, 423, (1973).

[115] A. de Masi, P. Ferrari and J. Lebowitz, Phys. Rev. Lett. **55**, 1947, (1985).

[116] K. Matsuo J. Stat. Phys. **16**, 169, (1977).

[117] G. F. Mazenko, M. J. Nolan and O.T.Valls, Phys. Rev. **B22**, 1263, (1980).

[118] G. F. Mazenko and J. Luscombe, Ann. Phys. **132**, 121, (1981).

[119] G. F. Mazenko and E. Oguz, J. Stat. Phys. **28**, 497, (1982).

[120] B. M. McCoy and T. T. Wu, *The Two-Dimensional Ising Model*, Harvard University Press, 1973.

[121] A. J. McKane, H. C. Luckock and A. J. Bray, Phys. Rev. **A41**, 644, (1990).

[122] D. W. McLaughlin and L. S. Schulman, J. Math. Phys. **12**, 2520, (1971).

[123] J.A. McLennan, *Introduction to Nonequilibrium Statistical Mechanics*, Prentice Hall, New Jersey, 1989.

[124] E. Medina, T. Hwa, M. Kardar and Y. c. Zhang, Phys. Rev. **A39**, 3053, (1990).

[125] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller, and E. Teller, Jour. Chem. Phys. **21**, 1087, (1953).

[126] *Nonequilibrium Phenomena I, The Boltzmann equation*, Ed. E. W. Montroll and J. L. Lebowitz, North Holland, 1983.

[127] J. R. Moyal, J. R. Stat. Soc. London, Ser.B **11**, 150, (1949).

[128] B. Muhlschlegel, in *Path Integrals*, Eds. G. Papadopoulus and J. I. Devreese, Plenum Press, (1979).

[129] M. A. Muñoz and P. L. Garrido, Jour. Phys. **A26**, 309, (1993).

[130] M. A. Muñoz and P. L. Garrido, in *II Granada Seminar in Computational Physics*, Ed. P. L. Garrido and J. Marro, p. 326, World Scientific, 1993.

[131] M. A. Muñoz, *Descripciones Contínuas de Sistemas Discretos Fuera del Equilibrio*, Universidad de Granada, 1991.

[132] M. A. Muõz and P. L. Garrido, *A Fokker-Planck equation for nonequilibrium competing dynamic models*, submitted to Phys. Rev. E

[133] M. A. Muõz and P. L. Garrido, *A test for two Fokker-Planck modelings of a master equation*, preprint.

[134] A. Neveu, in *New Developements in Quantum Field Theory and Statistical Mechanics*, Ed. M. Levy and P. Mitter, Plenum, 1980.

[135] M. J. Oliveira, J. F. F. Mendes, and M. A. Santos, Jour. Phys. **A26**, 2317, (1993)

[136] L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117, (1944).

[137] L. Onsager and S. Machlup, Phys. Rev. **91**, 1505, (1953); Phys. Rev. **91**, 1512, (1953).

[138] G. Parisi, *Statistical FIeld Theory*, Addison Wesley, 1988.

[139] G. Parisi and N. Sourlas, Nucl. Phys. **B206**, 321, (1982).

[140] R. K. Pathria *Statistical Mechanics*, Pergamon Press, 1971.

[141] W. Paul, D. W. Heermann and K. Binder, Jour. Phys. **A22**, 3325, (1989).

[142] O. Penrose, Rep. Prog. Phys. **42**, 129, (1979).

[143] A. M. Polyakov, *Gauge Fields and Strings*, Hardwood Academic Publishers, 1987

[144] P. Ramond, *Field Theory: A Modern Primer*, Benjamin, Reading, MA, 1980.

[145] E. L. Reichl *A Modern Course in Statistical Physics*, University of Texas Press, 1980.

[146] E. K. Riedel and F. J. Wegner, Phys. Rev. Lett. **29**, 349, (1972).

[147] E. K. Riedel and F. J. Wegner, Phys. Rev. **B9**, 294, (1974).

[148] H. Risken, *Tke Fokker-Planck Equation*, springer, Berlin, 1983.

[149] D. Ruelle, *Statistical Mechanics: Rigorous Results*, Benjamin, New York, 1969.

[150] D. Ruelle, Comm. Math. Phys. **82**, 137, (1981).

[151] B. Schmittmann and R. K. P. Zia, Phys. Rev. Lett. **66**, 357, (1991).

[152] C. Simo, in *Modern Methods in Celestial Mechanics*, Ed D. Benet and C. Froeschle, 285, Frontieres, 1990.

[153] I. N. Snedon *Elements of Differential Equations*, Mc Graw-Hill, New York, 1957.

[154] H. E. Stanley, Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena, Oxford science, 1987

[155] M. J. Stephen and J. L. McCauley, Phys. Lett. **A44**, 89, (1973).

[156] M. J. Stephen, Jour. Phys. **C13**, L83, (1979). 89, (1973).

[157] Stevens, Phys. Rep. **24C**, 1, (1976).

[158] R. L. Stratonovich; in *Topics in the Theory of Random Noise*, Vol 1, 16, Cambridge University Press, 1989.

[159] T. Tel, R. Graham and G. Hu, Phys. Rev. **A40**, 4065, (1989).

[160] C. J. Thompson, *Mathematical Statistical Mechanics*, Princeton University Press, 1979.

[161] M.F. Thorpe and D. Beeman, Phys. Rev. **B14**, 188, (1976).

[162] M. M. Tsypin, *The universal effective potential for the three-dimensional massive scalar field theory...*, Preprint, PITHA 94/9.

[163] M. C. Valsakumar, J. Stat. Phys. **32**, 545, (1983).

[164] D. J. Wallace, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Ed. C. Domb and M. S. Green, Vol. 6, 293, (1976).

[165] J. L. Vallés and J. Marro, J. Stat. Phys. **49**, 89, (1987).

[166] J. S. Wang and J. L. Lebowitz, J. Stat. Phys. **51**, 893, (1988).

[167] N. Wiener, J. Math. and Phys. **2**, 131, (1923); Proc. London. Math. Soc. Ser. 2,**2**, 454, (1924);

[168] K. G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **55**, 583, (1983); Scientific American, Oct, (1979).

[169] K. G. Wilson, Phys. Rev. **4**, 3174, (1971); Phys. Rev. **4**, 3184, (1971).

[170] K. G. Wilson, and J. Kogut, Phys. Rep. **12**, 75, (1974).

[171] B. S. DeWitt, Rev. Mod. Phys. **29**, 377, (1957); C. DeWitt-Morette, A. Maheswari, and B. Nelson, Phys. Rep. **50**, 255, (1979).

[172] E. Witten, Nucl. Phys. **B188**, 513, (1981).

[173] A. P. Young and R. B. Stinchcombe, Jour. Phys. **C8**, L535, (1975).

[174] R. K. P. Zia, Physica **A194**, 183, (1993).

[175] M. F. Zimmer, *Spontaneus Fluctuations in Nonequilibrium Systems and Broken Supersymmetry*, Preprint.

[176] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, Oxford Science, 1989.

[177] D. N. Zubarev, *Nonequilibrium Statistical Thermodynamics*, Consultant Boureau, Plenum, New york, 1984.