



UNIVERSIDAD  
**NACIONAL**  
DE COLOMBIA

# **SOLUCIÓN DEL PROBLEMA DE UNA ONDA DE CHOQUE EN UN MEDIO GASEOSO POR MÉTODOS ESTOCÁSTICOS**

**SOLUTION TO THE PROBLEM OF A SHOCK WAVE IN A  
GAS MEDIA BY STOCHASTIC METHODS**

**David Millán de la Cruz**

Universidad Nacional de Colombia  
Facultad de Ciencias, Departamento de Física  
Bogotá, Colombia

2017



# **Solución del problema de una onda de choque en un medio gaseoso por métodos estocásticos**

**David Millán de la Cruz**

Trabajo de grado presentado como requisito parcial para optar al título de:

**Magister en Ciencias-Física**

Director:

Ph.D. Frank Rodolfo Fonseca Fonseca

Línea de Investigación:

Mecánica estadística fuera del equilibrio

Universidad Nacional de Colombia  
Facultad de Ciencias, Departamento de Física  
Bogotá, Colombia

2017



## **Agradecimientos**

Expreso mi sincero agradecimiento al profesor Frank Rodolfo Fonseca Fonseca, profesor de la Universidad Nacional de Colombia y director del presente trabajo, por su ayuda como guía en este proyecto.



## Resumen

El presente documento contiene un trabajo teórico sobre ondas de choque en medios gaseosos, que fue abordado a partir del planteamiento de un modelo estocástico basado en la dinámica de partículas de gas en interacción mutua. Se partió de la formulación de una ecuación de Langevin para luego construir una ecuación de Fokker-Planck para la densidad de partículas y se solucionó dicha ecuación mediante el método de grupos de Lie para ecuaciones diferenciales. Las soluciones analíticas particulares para el espesor o tamaño de la onda se contrastaron con resultados experimentales reportados en un trabajo anterior.

Se concluyó que este modelo para la descripción teórica de las ondas de choque en gases promete ser una buena manera de estudiarlas, ya que los resultados obtenidos y contrastados con los experimentos para gas Argón y Nitrógeno así lo muestran para velocidades comprendidas entre 1 y 2,5 Mach.

**Palabras clave:** Onda de Choque, Modelo Estocástico, Ecuación de Langevin, Ecuación de Fokker-Planck, Grupos de Lie, Número Mach.

## **Abstract**

The present paper contains the theoretical research on shock waves in gaseous media, approached through a stochastic model based on the dynamics of gas particles in mutual interaction. It starts by the formulation of a Langevin equation to construct a Fokker-Planck equation for the density of particles which is solved using the Lie group method for differential equations. The particular analytical solutions for the thickness or size of the wave is contrasted with experimental results reported in a previous work.

It is concluded that this model promises to be a good theoretical way to study shock waves in gases, since the results obtained and contrasted with the experiments for Argon and Nitrogen thus show it in speeds between 1 and 2, 5 Mach.

**Keywords: Shock wave, Stochastic Model, Langevin Equation, Fokker-Planck Equation, Lie Groups, Mach Number.**



# Contenido

<b>1</b>	<b>Formulación del proyecto</b> .....	<b>3</b>
1.1	Definición del problema.....	3
1.1.1	Formulación del problema.....	4
1.2	Justificación.....	4
1.3	Objetivo general .....	4
1.4	Objetivos específicos .....	4
1.5	Metodología.....	5
<b>2</b>	<b>Marco teórico</b> .....	<b>7</b>
2.1	Ondas de choque.....	7
2.2	Visión histórica sobre el estudio de ondas de choque .....	7
2.3	Descripción estocástica de ondas de choque .....	8
2.4	Proceso aleatorio o estocástico.....	9
2.4.1	Densidad condicional de probabilidad .....	10
2.4.2	Momentos de un proceso estocástico .....	10
2.4.3	Estacionariedad y teorema de ergodicidad .....	11
2.4.4	Teorema de Wiener-Khinchin (Densidad espectral y funciones de correlación) .....	12
2.4.5	Procesos de Markov.....	12
2.4.6	Ecuación de Chapman-Kolmogorov .....	13
2.4.7	Ecuación maestra.....	14
2.4.8	Ecuación de Fokker-Planck.....	15
2.4.9	Resumen de procesos de Markov .....	19
2.5	Método de grupos de Lie para solución de ecuaciones diferenciales .....	20
2.5.1	Descripción del método.....	22
2.5.2	Aspectos importantes sobre el grupo de transformaciones de Lie y su papel en la obtención de soluciones.....	29
2.5.3	Ejemplo de uso: ecuación de difusión para partículas no interactuantes .....	31
2.5.4	Aplicación del método a un caso con solución analítica conocida: Oscilador armónico truncado.....	39
<b>3</b>	<b>Planteamiento y solución de la ecuación de onda de choque</b> .....	<b>49</b>
3.1	Planteamiento del modelo .....	49
3.1.1	Análisis dinámico.....	51
3.1.2	Construcción de la ecuación de Fokker-Planck para la onda de choque .....	51
3.2	Aplicación del método de grupos de Lie a la solución de la ecuación de la onda de choque.....	54
<b>4</b>	<b>Resultados</b> .....	<b>63</b>

4.1	Presentación y análisis de resultados .....	63
<b>5</b>	<b>Conclusiones y recomendaciones .....</b>	<b>71</b>
5.1	Oscilador armónico truncado .....	71
5.2	Problema de una onda de choque en un medio gaseoso.....	72
<b>6</b>	<b>Bibliografía .....</b>	<b>76</b>

## Lista de figuras

<b>Figura 2-1:</b> Resumen de procesos de Markov (traducción del inglés) [14, p. 127].....	19
<b>Figura 2-2:</b> Densidad de probabilidad para el oscilador armónico truncado .....	46
<b>Figura 2-3:</b> Error en la solución del oscilador armónico truncado .....	47
<b>Figura 4-1:</b> Densidad de probabilidad para la distribución de velocidades en una onda de choque en Nitrógeno gaseoso.....	65
<b>Figura 4-2:</b> Proceso de relajación o tendencia al equilibrio en Nitrógeno gaseoso para diferentes velocidades de flujo .....	65
<b>Figura 4-3:</b> Densidad en función de la posición para ondas de choque en Nitrógeno gaseoso a diferentes números Mach .....	69
<b>Figura 4-4:</b> Espesor de la onda de choque al 80% de la densidad para Nitrógeno gaseoso.....	70
<b>Figura 4-5:</b> Espesor de la onda de choque al 80% de la densidad para gas Argón .....	70

## Lista de tablas

<b>Tabla 2-1:</b> Sistema de ecuaciones acopladas para coeficientes infinitesimales. Ecuación de difusión.....	34
<b>Tabla 2-2:</b> Sistema de ecuaciones acopladas para coeficientes infinitesimales. Oscilador armónico truncado .....	42
<b>Tabla 3-1:</b> Sistema de ecuaciones acopladas para coeficientes infinitesimales. Onda de choque.....	56
<b>Tabla 3-2:</b> Álgebra de simetría para la ecuación de onda de choque .....	57

## Lista de símbolos y abreviaturas

A menos que se especifique otra cosa, los símbolos usados en este documento tienen los siguientes significados.

### Símbolos con letras latinas

Símbolo	Término	Unidad SI	Definición
$a_n$	Momento de distribución de probabilidad		$a_n(y)$ $= \int_{-\infty}^{\infty} \Delta y^n w(y, \Delta y) d\Delta y$
$a_i$	Constante de Lie		Numeral 2.5
$D$	Coefficiente de difusión	$(m^2/s)$	
$D_0$	Diámetro de una esfera	m	
$F$	Distribución de probabilidad		Numeral 2.4
$f'$	Fuerza Hooke	N	$f' = -kx$
$F_d$	Fuerza de Stokes	N	$F_d = 6\pi\nu RV$
$f$	Densidad de probabilidad	Adimensional	Numeral 2.4
$G$	Grupo de Lie		Numeral 2.5
$g$	Transformada de Lie		Numeral 2.5
$H_m$	Polinomio de Hermite de orden $m$		Numeral 2.5.4
$k$	Constante de elasticidad de Hooke	$N/m$	
$k_B$	Constante de Boltzmann	$J/K$	
$L$	Espesor de una onda de choque	m	Numeral 4
$l$	Longitud de onda de la luz	m	

Símbolo	Término	Unidad SI	Definición
$M$	Número Mach	Adimensional	Número de veces que la velocidad de un objeto es mayor que la velocidad del sonido
$m$	Masa	kg	
$P$	Densidad de probabilidad para procesos estacionarios		Ecuación 2.17
$\hat{P}$	Presión	Pascales	
$P_T^n$	Prolongación n-ésima		Ecuación 2.24
$Q$	Ecuación característica de un campo vectorial		Ecuación 2.26
$R_0$	Radio de una esfera	m	
$R_e$	Número de Reynolds	Adimensional	$R_e = \frac{vD_0}{\varpi}$
$R_L$	Reflectividad de la luz	Adimensional	Numeral 4
$R_L'$	Reflectividad reducida	Adimensional	Numeral 4
$s$	Densidad espectral de fluctuaciones		Ecuación 2.11
$t$	Tiempo	s	
$T$	Temperatura	k	
$u$	Variable dependiente		
$V$	Generador infinitesimal de simetrías (campo vectorial)		Numeral 2.5.1
$w$	Probabilidad de transición por unidad de tiempo	$s^{-1}$	Numeral 2.4.7
$x$	Posición	m	
$\langle x \rangle$	Media estadística		Ecuación 2.4
$\langle xy \rangle$	Correlación entre dos variables aleatorias		Ecuación 2.5
$\langle\langle xy \rangle\rangle$	Covarianza		Ecuación 2.6

## Símbolos con letras griegas

Símbolo	Término	Unidad SI	Definición
$\Gamma$	Función de correlación entre dos variables aleatorias para la relación de Fluctuación-Disipación	$J/Kgs$	$\Gamma = 2\langle v^2 \rangle \frac{\gamma}{m}$
$\gamma$	Coeficiente de arrastre relacionado con la fuerza de Stokes	$Kg/s$	$\gamma = 6\pi\nu R$
$\Delta_v$	Representación de una ecuación diferencial		
$\Delta n$	Cambio de índice de refracción de la luz	adimensional	
$\delta$	Delta de Dirac	Adimensional	
$\eta$	Coeficiente infinitesimal		Numeral 2.5.1
$\lambda$	Parámetro de Lie		Numeral 2.5.1
$\mu$	viscosidad dinámica	$Pa \cdot s$	
$\nu$	velocidad	$m/s$	
$\xi$	Función de probabilidad o también, coeficiente infinitesimal para variables independientes		Numeral 2.5.1
$\varpi$	Viscosidad cinemática	$m^2/s$	
$\rho$	Densidad de probabilidad en la ecuación de Fokker-Planck. Equivalente a $P$		
$\varrho$	Coeficiente de dilatación adiabática de un gas	Adimensional	Relación de calores específicos
$\sigma$	Fuerza aleatoria de un proceso estocástico	N	Numeral 3.1.1
$\tau$	Tiempo de relajación de un sistema estocástico	s	$\tau = \frac{m}{\gamma}$
$\varphi$	Coeficiente infinitesimal para variables dependientes		Numeral 2.5.1

Símbolo	Término	Unidad SI	Definición
$\omega$	Frecuencia estadística		

## Subíndices

Subíndice	Término
$i$	Indica una variable específica $i = 1,2,3, \dots$
$J$	Representa una derivada respecto una o más variables
$p$	Número entero que denota una cantidad de variables independientes
$q$	número entero que denota una cantidad de variables dependientes
0	Indica condiciones normales de temperatura y presión (NTP por sus siglas en inglés)

## Superíndices

Superíndice	Término
$i$	sobre $\xi$ representa el coeficiente infinitesimal de una variable independiente específica $i = 1,2,3, \dots$
$J$	Sobre $\varphi$ representa el coeficiente infinitesimal de una prolongación
$n$	denota un orden de derivada
$p$	Número entero que denota una cantidad de variables independientes
$q$	número entero que denota una cantidad de variables dependientes



**Superíndice Término**

---

$\alpha$	sobre $\varphi$ representa el coeficiente infinitesimal de una variable dependiente específica $\alpha = 1,2,3, \dots$
----------	--



# Introducción

Una onda de choque es un fenómeno presente en gases, sólidos, líquidos y plasma, que se caracteriza por un aumento repentino de la densidad debido a una perturbación de la materia. Este fenómeno ocurre en las toberas de los motores cohete donde el gas que se expulsa a alta velocidad interactúa con el gas a baja velocidad presente en la atmósfera. En aeronaves que viajan a velocidades supersónicas es común ver las ondas de choque como un disco o cono de color blanco delante o en alguna sección de la aeronave; este disco es visible debido a que en él ocurre el cambio abrupto de presión. El fenómeno se presenta también en la activación de artefactos explosivos, ruptura de recipientes a alta presión, explosiones de supernovas, túneles de viento supersónico y meteoritos entrando a la atmósfera terrestre.

Los efectos que las ondas de choque producen en el medio circundante son conocidos desde hace mucho tiempo; se sabe que en un gas o líquido, divide el fluido en dos regiones; una región donde la velocidad es mayor que la del sonido y otra en la que la velocidad es menor. En la zona de baja velocidad la presión estática, temperatura y densidad son mayores, mientras que la presión dinámica disminuye. Esta división del medio en dos zonas de propiedades diferentes convierte el proceso en un proceso fuera del equilibrio.

En este trabajo se pretende describir una onda de choque en un medio gaseoso usando la mecánica estadística para encontrar el comportamiento de la densidad respecto a las variables posición, velocidad y tiempo, partiendo de una formulación microscópica. Se inicia con una formulación dinámica de una partícula a alta velocidad en contacto con un medio estático, para llegar a una expresión matemática que describe el fenómeno de la onda de choque. Dicha ecuación es una ecuación de Fokker-Planck para la densidad de partículas, que luego se soluciona por el método de grupos de Lie.



# 1 Formulación del proyecto

## 1.1 Definición del problema

Las ondas de choque en gases han sido descritas teóricamente desde hace muchos años mediante el uso de diferentes herramientas como por ejemplo, las relaciones de Rankine-Hugoniot utilizadas por Brinkley y Kirkwood [1], Jih Kim Chao y Goldstein [2] y Gavrilyuk y Saurel [3] entre otros, que proporcionan información sobre las características macroscópicas del fluido antes y después de la zona de alta densidad, es decir; brindan información sobre presión, densidad, temperatura y velocidad en las regiones aledañas pero no en la zona misma donde se encuentra la onda de choque [4]. Muchas cosas se han intentado para lograr describir las propiedades termodinámicas del gas en la zona de alta densidad, algunas de ellas son el uso de las ecuaciones de Navier-Stokes y la ecuación de Burgers, como en los trabajos de Elizarova, Shirokov y Montero [5] y Beatus, Tlusty y Bar-Ziv [6]. Durante el siglo XX se estudiaron con éxito a partir de formulaciones mecánico-estadísticas empleando la ecuación de Fokker-Planck, como en el caso de Fernández-Feria y Fernández de la Mora [7]. Esta formulación ha demostrado ser muy útil para describir procesos estocásticos de gran importancia en Física; dichos estudios se han basado en obtener soluciones a la ecuación de Fokker-Planck mediante el uso de herramientas computacionales como el método de Montecarlo, cuyo caso claro es el de Kirk y Schneider [8] para ondas de choque o como el método de Elementos Finitos, usado por Floris [9] para la ecuación general de Fokker-Planck, obteniendo así aproximaciones numéricas o bien mediante consideraciones teóricas que tienen como objetivo simplificar el problema, pero agregan errores a las soluciones.

A pesar del amplio uso que ha tenido la descripción estocástica a través de la ecuación de Fokker-Planck en la descripción de fenómenos físicos diversos, como se puede constatar realizando una búsqueda de artículos relacionados con esta ecuación y de que su aplicación para la descripción de ondas de choque no es un tema nuevo, las soluciones

planteadas en la literatura son particulares o aproximadas, indicando que es un tema de investigación vigente.

### **1.1.1 Formulación del problema**

Teniendo en cuenta la importancia cada vez mayor que tiene la descripción estocástica de muchos procesos en Física y la necesidad de encontrar soluciones cada vez más precisas al problema de ondas de choque en gases, se plantea la siguiente pregunta como orientadora del presente trabajo: ¿cómo obtener soluciones al problema de una onda de choque en medio gaseoso a partir de su descripción en términos de procesos estocásticos?

## **1.2 Justificación**

La investigación en el tema de las ondas de choque ha estado ligada a la industria desde sus comienzos y aún en la actualidad, en el área aeroespacial. Desde sus inicios han venido surgiendo nuevas áreas de investigación como por ejemplo: explosiones de supernovas, arcos de choque en planetas, coronas solares, entre otras en astrofísica, terremotos, erupciones volcánicas y cráteres de impacto en geología, tsunamis, grandes olas en estuarios, además de muchas aplicaciones a la medicina. Por otro lado, los procesos estocásticos son un tema abierto a la investigación en la medida en que para la mayoría de los procesos naturales no existen soluciones generales exactas, incluyendo aquí el problema de las ondas de choque. El estudio de las ondas de choque con base en procesos estocásticos promete ser un área fértil para la investigación.

## **1.3 Objetivo general**

Solucionar el problema de una onda de choque en un medio gaseoso mediante su descripción en términos de procesos estocásticos.

## **1.4 Objetivos específicos**

Plantear una ecuación estocástica para el problema de una onda de choque en un medio gaseoso.

Solucionar la ecuación de la onda de choque por cualquiera de los tres métodos siguientes: solución exacta, solución semiexacta o solución numérica.

Realizar comparativos con trabajos similares teóricos y experimentales.

## **1.5 Metodología**

La metodología que se sigue en el presente trabajo es sencilla: En primer lugar se plantea un modelo matemático para representar la formación de la onda de choque en gases, basado en el análisis dinámico de una partícula de gas dentro de la onda. Dicho análisis se basa en la formulación de la ecuación de Langevin para las fuerzas experimentadas por la partícula y la adopción del comportamiento cinemático del flujo de tráfico como representación de la cinemática de la partícula.

En segundo lugar se plantea la ecuación de Fokker-Planck para el fenómeno, cuyos momentos de distribución se obtienen de la formulación de la ecuación de Langevin y del teorema de fluctuación-disipación.

Posteriormente se recurre al uso del método de grupos de Lie para encontrar soluciones analíticas particulares de la ecuación.





## **2 Marco teórico**

### **2.1 Ondas de choque**

Las ondas de choque se presentan en aquellos casos en los que la masa a alta velocidad es detenida abruptamente. En el caso de partículas de un gas, sólo se presentan si la velocidad inicial de las partículas es mayor que la velocidad del sonido [4, p. 456]. Una vez presente, la onda divide el fluido en dos regiones; una región donde la velocidad es mayor que la del sonido y una segunda región en la que la velocidad es menor que en la primera, pero no necesariamente menor que la velocidad del sonido; en la zona de baja velocidad la presión estática, temperatura y densidad son mayores, mientras que la presión dinámica disminuye [4]. El espesor de la franja divisoria suele ser del orden de  $10^{-5} \text{ cm}$  para el aire [4, p. 456], mientras que en astrofísica se calculan valores del orden de cientos de kilómetros como es el caso de la onda de choque formada por la interacción entre la magnetósfera terrestre y el viento solar [10, p. 33]. La onda de choque es pues un fenómeno caracterizado por el cambio abrupto en las propiedades del medio que divide la región en dos secciones, siendo así un proceso fuera del equilibrio.

### **2.2 Visión histórica sobre el estudio de ondas de choque**

Según Krehl [10], el estudio de las ondas de choque inicia con la investigación sobre la resistencia al avance en balas de mosquete en 1746 por Benjamin Robins y en otras armas en 1808 por Hutton. Se discutía si el sonido se propagaba de igual forma sin importar la amplitud de la onda. El tema avanzó luego de la aparición del método de las características, que permitió resolver ecuaciones diferenciales en el área de la aerodinámica de alta velocidad. Hacia los años 1808-1869 se realizaron medidas de la velocidad del sonido en el aire usando armas de fuego; Se evidenció por primera vez que las llamadas “ondas de amplitud finita” se propagaban a mayor velocidad que las “ondas de amplitud infinitesimal”, al escuchar que el sonido de un disparo llegaba primero que la

orden de disparo a una determinada distancia. Los primeros trabajos matemáticos respecto a las “ondas de amplitud finita”, conocidas actualmente como ondas de choque, fueron realizados por Poisson, Airy, Challis, Earnshaw, Riemann y Rankine. Entre los años 1822 y 1893 se realizaron diversos experimentos en los que se midió con mayor exactitud la velocidad del sonido en la atmósfera y se tomaron las primeras fotografías de las ondas de choque causadas por descargas eléctricas, usando fotografía schlieren y gráfico de sombras. Entre 1888 y 1930 ocurrió la invención de la tobera laval y el túnel de viento que facilitaron el estudio de las ondas de choque estacionarias. Durante esta época se introdujo un parámetro adimensional que relaciona la velocidad del flujo y la velocidad del sonido, conocido como número Mach, en honor a Ernst Mach y apareció una nueva área de estudio conocida como gas dinámica. Entre 1930 y 1939 se construyen túneles de viento supersónicos y se incrementan las investigaciones en aerodinámica supersónica. Entre los años 1939 y 1949 se produjo un gran avance en el estudio de las ondas de choque, motivado por el uso de armas durante la guerra, como los misiles y aviones supersónicos, la invención del pulsorreactor, la bomba atómica y las armas nucleares. Aparece también el fenómeno de ondas de choque en sólidos y las interacciones entre ondas de choque como nuevas áreas de estudio. Desde 1950 hasta la época actual ha habido un gran interés en el tema, motivado principalmente por la era espacial y los vuelos supersónicos, además de otras áreas de estudio como las ondas de choque en supernovas, el arco de choque del planeta tierra que desvía el viento solar, el estudio de la corona solar, la posibilidad de existencia de arcos de choque en otros planetas y el frente de choque de terminación fuera de nuestro sistema solar por la interacción entre el viento solar y el medio interestelar. La invención del láser ha hecho posible crear ondas de choque por estimulación de pequeños volúmenes de gas, creando así ondas de choque muy fuertes a nivel microscópico. También se encuentran abiertas varias áreas de estudio en Geología como la propagación de ondas de choque en los suelos, cráteres de impacto, erupciones volcánicas entre otras.

## **2.3 Descripción estocástica de ondas de choque**

El cambio abrupto en las condiciones del gas hace que se pueda tratar el problema como un problema de mecánica estadística describiendo el fenómeno por modelos estocásticos fuera del equilibrio. Existen antecedentes de este tipo de tratamiento como por ejemplo, los trabajos de Fernández-Feria y Fernández de la Mora [7], Tidman [11], Viswanathan *et*

a/. [12] y Keishiro Niu [13], en los que se utiliza la ecuación de Fokker-Planck como modelo para la descripción del fenómeno. Aunque esta ecuación se deriva para procesos en estado estable o de equilibrio, en estos trabajos la ecuación ha demostrado ser útil para procesos fuera del equilibrio y se han obtenido soluciones aproximadas.

## 2.4 Proceso aleatorio o estocástico

En el presente compendio sobre procesos estocásticos se explican aquellos conceptos, definiciones, teoremas y ecuaciones relacionadas con el origen de la ecuación de Fokker-Planck; es una interpretación de lo contenido en el libro de M. Scott [14], de donde se extrajeron también las expresiones matemáticas que vienen a continuación.

Un proceso estocástico se describe por medio de funciones aleatorias correlacionadas o no; el proceso puede estar descrito por una función, por ejemplo  $\xi(\omega, t)$ , donde  $\omega$  representa un conjunto de variables aleatorias  $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n$  que varían en este caso respecto al tiempo. De esta forma, es posible que el proceso describa la distribución de probabilidad de una de las variables  $\omega$  en función del tiempo o que describa la distribución de probabilidad de todas las variables  $\omega$  para un tiempo determinado.

Si por simplicidad se denota  $\xi(t)$  como la distribución de probabilidad de las variables para un tiempo fijo, y se tiene un conjunto de distribuciones, uno para cada valor temporal  $t_1, t_2, \dots, t_n$ , es posible armar una distribución de probabilidad acumulativa de todas las variables aleatorias como:

$$F(x_1, \dots, x_n; t_1, \dots, t_n) = P\{\xi(t_1) \leq x_1, \dots, \xi(t_n) \leq x_n\} \quad (2.1)$$

La condición  $\xi(t) \leq x$  expresa el número de variables  $\omega$  que tienen valores por debajo de  $x$  respecto al número total de variables. Esto quiere decir que la distribución acumulativa es el conjunto de probabilidades para cada variable aleatoria  $\xi(t)$  que se encuentran por debajo de cada valor  $x$ .

Existe una función muy útil en procesos estocásticos llamada densidad de probabilidad que asigna a cada variable un valor entre 0 y 1, siendo 1 la máxima probabilidad; esta

función  $f(x)$  identifica qué tan probable es cada variable. Se encuentra como la derivada de la función aleatoria o de la distribución acumulativa respecto a la variable aleatoria.

$$f(x_1, \dots, x_n; t_1, \dots, t_n) = \frac{\partial^n F(x_1, \dots, x_n; t_1, \dots, t_n)}{\partial x_1 \dots \partial x_n} \quad (2.2)$$

La función acumulativa cumple con la condición de simetría que expresa que bajo cualquier permutación de variables, la función sigue siendo la misma y con la condición de compatibilidad; cada variable es evaluada en un tiempo  $t$  y por tanto su valor está asociado a él [14].

### 2.4.1 Densidad condicional de probabilidad

Se interpreta como la densidad de probabilidad para la ocurrencia de un evento  $x_2$  en un tiempo  $t_2$ , condicionada según el evento anterior  $x_1$  en el tiempo  $t_1$ . De esta forma la densidad de probabilidad acumulativa se puede representar como en la ecuación 2.3., es decir; le densidad de probabilidad para la ocurrencia de los eventos 1 y 2 en sus respectivos tiempos es igual a la densidad de probabilidad para la ocurrencia de 2, habiendo ocurrido previamente 1, multiplicado por la densidad de probabilidad para el evento 1 en el tiempo  $t_1$ .

$$f(x_1, x_2; t_1, t_2) = f(x_2, t_2 | x_1, t_1) f(x_1, t_1) \quad (2.3)$$

La expresión  $f(x_2, t_2 | x_1, t_1)$  representa la densidad condicional de probabilidad.

### 2.4.2 Momentos de un proceso estocástico

#### *Media*

Es el valor promedio de una distribución de datos y se encuentra como la suma sobre todo el espacio de variables  $x$  de cada variable multiplicada por su correspondiente probabilidad.

$$\mu(t) = \langle \xi(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x f(x, t) dx \quad (2.4)$$

#### *Función de Correlación*

Es una función que da información acerca de la relación de dos o más variables en puntos diferentes del proceso. Si la correlación es entre dos variables aleatorias, se llama correlación cruzada y si la correlación es para la misma variable se llama auto correlación.

$$B(t_1, t_2) = \langle \xi(t_1)\xi(t_2) \rangle = \iint_{-\infty}^{\infty} x_1 x_2 f(x_1, x_2; t_1, t_2) dx_1 dx_2 \quad (2.5)$$

#### *Covarianza*

Representa el grado de variación conjunta de dos variables aleatorias; si es positiva, indica que las variables son proporcionales, si es negativa indica que las variables son inversas. Para variables no correlacionadas la covarianza es cero, aunque lo contrario no es necesariamente cierto [15].

$$c(t_1, t_2) = \langle \{\xi(t_1) - \mu(t_1)\} \cdot \{\xi(t_2) - \mu(t_2)\} \rangle \equiv \langle \langle \xi(t_1)\xi(t_2) \rangle \rangle \quad (2.6)$$

### **2.4.3 Estacionariedad y teorema de ergodicidad**

#### *Estacionariedad*

Un proceso estocástico es estacionario si la función de distribución no cambia para un tiempo  $t_2 = t_1 + \tau$ , es decir; después de un tiempo  $t_1$  no hay más cambios en la distribución (ha alcanzado el equilibrio).

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n; t_1 + \tau, t_2 + \tau, \dots, t_n + \tau) = f(x_1, x_2, \dots, x_n; t_1, t_2, \dots, t_n) \quad (2.7)$$

Entonces no se podrá encontrar relación de correlación entre dos distribuciones de probabilidad conjuntas y estacionarias usando tiempos mayores a los de equilibrio, debido a que ya no hay evolución del sistema. Para estos sistemas la función de correlación se debe describir en términos de la diferencia de tiempos, por ejemplo: para un sistema bidimensional, la función de auto correlación  $\langle \xi(t)\xi(s) \rangle = B(t - s) = B(\tau)$ . Un proceso de este tipo se llama totalmente estacionario y queda totalmente definido por su función de autocorrelación y la media que es una constante [14].

#### *Teorema de Ergodicidad*

Fue demostrado por D. G. Birkhoff [16] y establece que en un sistema estocástico estacionario el promedio temporal es igual a la media aritmética, si el tiempo es lo

suficientemente grande para que el sistema alcance el equilibrio. Lo anterior es también cierto para todos los órdenes de correlación. De forma matemática se tiene que:

$$\langle \xi(t) \rangle \approx \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \xi(t) dt \quad (2.8)$$

y

$$\langle \xi(t)\xi(t + \tau) \rangle \approx \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \xi(t)\xi(t + \tau) dt \quad (2.9)$$

Si

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^T \langle \xi(0)\xi(\tau) \rangle d\tau = 0 \quad (2.10)$$

La importancia de este teorema radica en la simplicidad al momento de comparar resultados experimentales con teóricos.

#### 2.4.4 Teorema de Wiener-Khinchin (Densidad espectral y funciones de correlación)

La densidad espectral, también conocida como espectro de fluctuaciones se define como:

$$s(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi T} |\hat{x}(\omega)|^2 \quad (2.11)$$

Donde  $\hat{x}(\omega) = \int_0^T \xi(t)e^{-i\omega t} dt$  es la transformada de Fourier del proceso estocástico. La correspondencia entre la función de auto correlación y el espectro de fluctuaciones para procesos estacionarios se conoce como el teorema de Wiener-Khinchin, demostrado para el caso determinista por N. Wiener [17] y para procesos estocásticos por A. Khintchine [18] que se deriva del tratamiento del proceso en el dominio de la frecuencia y del teorema de ergodicidad. Esta correspondencia tiene la forma de la ecuación siguiente:

$$B(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega\tau} s(\omega) d\omega \quad (2.12)$$

#### 2.4.5 Procesos de Markov

Un proceso estocástico, es decir; un fenómeno aleatorio que involucra el tiempo, queda bien definido mediante la función de distribución de probabilidad  $F(x_1, \dots, x_n; t_1, \dots, t_n)$  o

la función de densidad  $f(x_1, \dots, x_n; t_1, \dots, t_n)$ . Según las características de estas dos funciones, los procesos aleatorios se pueden clasificar en dos grandes grupos:

#### *Procesos puramente aleatorios*

Son procesos en los que cada variable es estadísticamente independiente de las demás y por lo tanto la probabilidad conjunta es igual a la multiplicación de las probabilidades individuales.

$$F(x_1, \dots, x_n; t_1, \dots, t_n) = F(x_1, t_1)F(x_2, t_2) \dots F(x_n, t_n) \quad (2.13)$$

#### *Procesos de Markov*

Fue planteado por Andrey Markov en un artículo del año 1906 y reeditado en inglés en [19]. Es un proceso en el que las probabilidades individuales son independientes pero condicionadas por el proceso anterior según una jerarquía temporal  $t_1 < t_2 \dots < t_n$ .

$$f(x_1, x_2, x_3; t_1, t_2, t_3) = f(x_3, t_3 | x_2, t_2) f(x_2, t_2 | x_1, t_1) f(x_1, t_1) \quad (2.14)$$

En la ecuación 2.14 cada densidad de probabilidad está condicionada por el paso anterior pero no por los pasos anteriores a ese, lo que hace que cada densidad condicional sea independiente de las otras. Para que un proceso sea Markoviano es necesario que la condición se cumpla para todas las densidades de probabilidad.

### **2.4.6 Ecuación de Chapman-Kolmogorov**

La ecuación de Chapman-Kolmogorov es una expresión de una densidad de probabilidad condicional para una posición final, dado una inicial, en función de las densidades de los pasos intermedios, que se escribe en forma integral, derivada a partir del análisis de un proceso de Markov; si se considera un proceso estocástico de Markov de tres pasos  $x_1, x_2, x_3$  que ocurren en tiempos  $t_1 < t_2 < t_3$  respectivamente, se tiene que la ecuación de Chapman-Kolmogorov para la densidad de probabilidad de ocurrencia del paso  $x_3$  dado el paso  $x_1$  es:

$$f(x_3, t_3 | x_1, t_1) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x_3, t_3 | x_2, t_2) f(x_2, t_2 | x_1, t_1) dx_2 \quad (2.15)$$

La ecuación 2.15 cumple con las condiciones de independencia de las densidades de probabilidad y jerarquía temporal, características de un proceso de Markov, por lo tanto lo describe completamente. Para procesos estacionarios, la ecuación de Chapman-Kolmogorov toma la forma de la ecuación 2.16.

$$P(x_3|x_1, \tau + \tau') = \int_{-\infty}^{\infty} P(x_3|x_2, \tau') P(x_2|x_1, \tau) dx_2 \quad (2.16)$$

Estas ecuaciones 2.15 y 2.16 permiten pasar de un proceso a pequeña escala, donde se puede considerar reversible, a un proceso a gran escala o irreversible, mediante la construcción de un modelo para la pequeña escala y la solución de la ecuación. Lo anterior tiene el inconveniente de que la ecuación es no lineal y no se conoce una solución general [14].

### 2.4.7 Ecuación maestra

La ecuación maestra resulta de incluir en la ecuación de Chapman-Kolmogorov un modelo para la probabilidad de transición para tiempos cortos (tiempos en los que el proceso se puede considerar reversible) [14]. El beneficio que trae es la linealidad respecto a las probabilidades de transición, lo que la hace más fácil de resolver para sistemas mesoscópicos. En otras palabras, la ecuación maestra es una alternativa para describir procesos de Markov sin el inconveniente de la no linealidad de las probabilidades de transición que tiene la ecuación de Chapman-Kolmogorov.

El modelo adoptado para la probabilidad de transición para tiempos cortos es el siguiente:

$$P(x|z, \tau') = (1 - a_0\tau')\delta(x - z) + \tau'w(x|z) \quad (2.17)$$

$$a_0(z) = \int_{-\infty}^{\infty} w(x|z)dx$$

Donde  $P(x|z, \tau')$  es la densidad condicional de probabilidad para un paso de  $z$  a  $x$  en un tiempo  $\tau'$ , el primer término de la derecha representa la probabilidad de que no ocurra y el segundo término representa la probabilidad de que ocurra.  $a_0(z)$  es el primer momento de



salto y  $w(x|z)$  es la probabilidad de transición por unidad de tiempo. Bajo la condición de la ecuación 2.17 la ecuación maestra queda de la siguiente forma para procesos continuos:

$$\frac{\partial P(x_3|x_1, \tau)}{\partial \tau} = \int_{-\infty}^{\infty} [w(x_3|x_2)P(x_2|x_1, \tau) - w(x_2|x_3)P(x_3|x_1, \tau)] dx_2 \quad (2.18)$$

De forma discreta:

$$\frac{d}{dt} P_n(t) = \sum_m w_{nm} P_m(t) - w_{mn} P_n(t) \quad (2.19)$$

Donde  $m$  y  $n$  son estados y  $w_{nm}$  es la probabilidad de transición por unidad de tiempo del estado  $m$  al  $n$ .

Es necesario puntualizar bajo qué condiciones se obtiene la ecuación maestra:

- Se parte de la ecuación que describe un proceso de Markov, por lo tanto también lo describe.
- Se asume un proceso estacionario, es decir; describe procesos en los que el sistema pasa de un equilibrio alcanzado durante un tiempo  $\tau$ , después de una perturbación, a un nuevo estado de equilibrio después de un tiempo  $\tau'$  adicional, siendo  $\tau'$  lo suficientemente grande para que las variables alcancen el equilibrio, pero lo suficientemente pequeño en comparación a  $\tau$  (tiempo del proceso) para poder asumir que  $\tau' \rightarrow 0$ .
- Al asumir tiempos de transición cortos, se considera que el proceso es reversible microscópicamente.

## 2.4.8 Ecuación de Fokker-Planck

La ecuación de Fokker-Planck es una forma aproximada de la ecuación maestra derivada de dos formas: una de ellas fue formulada por Kolmogorov [20] y la otra por Adriaan Fokker y Max Planck, ver [14, pp. 124-126]. El desarrollo hecho por Fokker y Planck hace que a sus consideraciones se les pueda encontrar más fácilmente un sentido físico. Partiendo de la ecuación maestra ecuación 2.18 se simplifica su escritura mediante la sustitución de variables:  $x_1 = y_0$ ,  $x_2 = y'$ ,  $x_3 = y$  y el cambio de notación de las probabilidades, donde  $P(y', \tau)$  es una densidad de probabilidad condicional.

$$\frac{\partial P(y, \tau)}{\partial \tau} = \int_{-\infty}^{\infty} [w(y|y')P(y', \tau) - w(y'|y)P(y, \tau)] dy'$$

Tomando la transición de  $y'$  a  $y$  como un salto  $\Delta y$  se tiene que  $\Delta y = y - y'$  entonces las probabilidades de transición quedan de la siguiente manera

$$w(y|y') = w(y', \Delta y) \equiv w(y - \Delta y, \Delta y)$$

$$w(y'|y) = w(y, -\Delta y)$$

La primera ecuación se interpretan como la probabilidad de que estando en  $y'$  dé un salto  $\Delta y$  hasta la posición  $y$ . La segunda ecuación se interpreta como la probabilidad de que estando en  $y$  dé un paso  $-\Delta y$  hasta la posición  $y'$ . Ahora se hacen las siguientes suposiciones:

- Sólo ocurren pequeños saltos, es decir; existe una cantidad  $\delta$  tal que:

$$\delta > 0 \text{ tal que } w(y', \Delta y) \approx 0 \text{ para } |\Delta y| > \delta$$

$$w(y' + \Delta y, \Delta y) \approx w(y', \Delta y) \text{ para } |\Delta y| < \delta$$

- $P(y, \tau)$  varía suavemente con  $y$ :

$$P(y + \Delta y, \tau) \approx P(y, \tau) \text{ para } |\Delta y| < \delta$$

Bajo las consideraciones anteriores es posible expandir en series de Taylor  $w$  y  $P$  en  $y'$  alrededor de  $y$  hasta el segundo término, obteniéndose así la ecuación de Fokker-Planck:

$$\frac{\partial P(y, \tau)}{\partial \tau} \approx -\frac{\partial}{\partial y} [a_1(y)P(y, \tau)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} [a_2(y)P(y, \tau)] \quad (2.20)$$

Con:

$$a_1(y) = \int_{-\infty}^{\infty} \Delta y w(y, \Delta y) d\Delta y$$

Como el primer momento de la distribución y

$$a_2(y) = \int_{-\infty}^{\infty} \Delta y^2 w(y, \Delta y) d\Delta y$$

Como el segundo momento de la distribución. El primer término de la ecuación 2.20 es un término convectivo, mientras que el segundo es el término de fluctuación o de difusión. A la expansión en series de Taylor con todos los términos se le llama expansión de Kramers-moyal y la ecuación resultado es:

$$\frac{\partial P(y, \tau)}{\partial \tau} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial y^n} [a_n(y) P(y, \tau)] \quad (2.21)$$

Con

$$a_n(y) = \int_{-\infty}^{\infty} \Delta y^n w(y, \Delta y) d\Delta y$$

La ecuación de Fokker-Planck es una forma particular de la expansión de Kramers-Moyal y sirve como un reemplazo de la ecuación maestra. Tiene solución si las probabilidades de transición son lineales respecto a las variables de estado. En caso contrario no se conoce solución exacta y se suelen emplear métodos aproximativos [14].

Esta ecuación es una forma alternativa de la ecuación de Chapman-Kolmogorov que describe un proceso de Markov, es decir, un proceso aleatorio en el que existe jerarquía temporal entre las diferentes transiciones de estado de un sistema. Esta forma alternativa se obtiene por medio de ciertas consideraciones que aunque limitan el rango de acción de la ecuación de Chapman-Kolmogorov, posee una forma mucho más solucionable. Una descripción detallada sobre la construcción de estas dos ecuaciones se encuentra en [14].

En la ecuación de Fokker-Planck,  $\tau$  representa el intervalo de tiempo entre un estado y otro (transición), donde se considera que la densidad cambia de un estado inicial a uno final o de equilibrio a través de pequeñas transiciones discretas que ocurren en intervalos de tiempo iguales  $\tau$ , que son lo suficientemente pequeños como para que cada transición sea reversible, pero lo suficientemente grande como para que en cada transición se alcance el equilibrio. Es decir, la evolución de la densidad ocurre a través de pequeños saltos de igual

duración, donde cada uno de ellos es un subestado de equilibrio. Esto implica que cada estado de equilibrio es independiente del anterior.

La variable dependiente  $P$  varía suavemente respecto a las variables independientes, es decir; existe una cantidad  $\delta > 0$  tal que para cada transición, después de un tiempo  $\tau$ , el cambio en la variable independiente  $y$ ,  $\Delta y$  causa un pequeño salto en el valor de  $P$ :

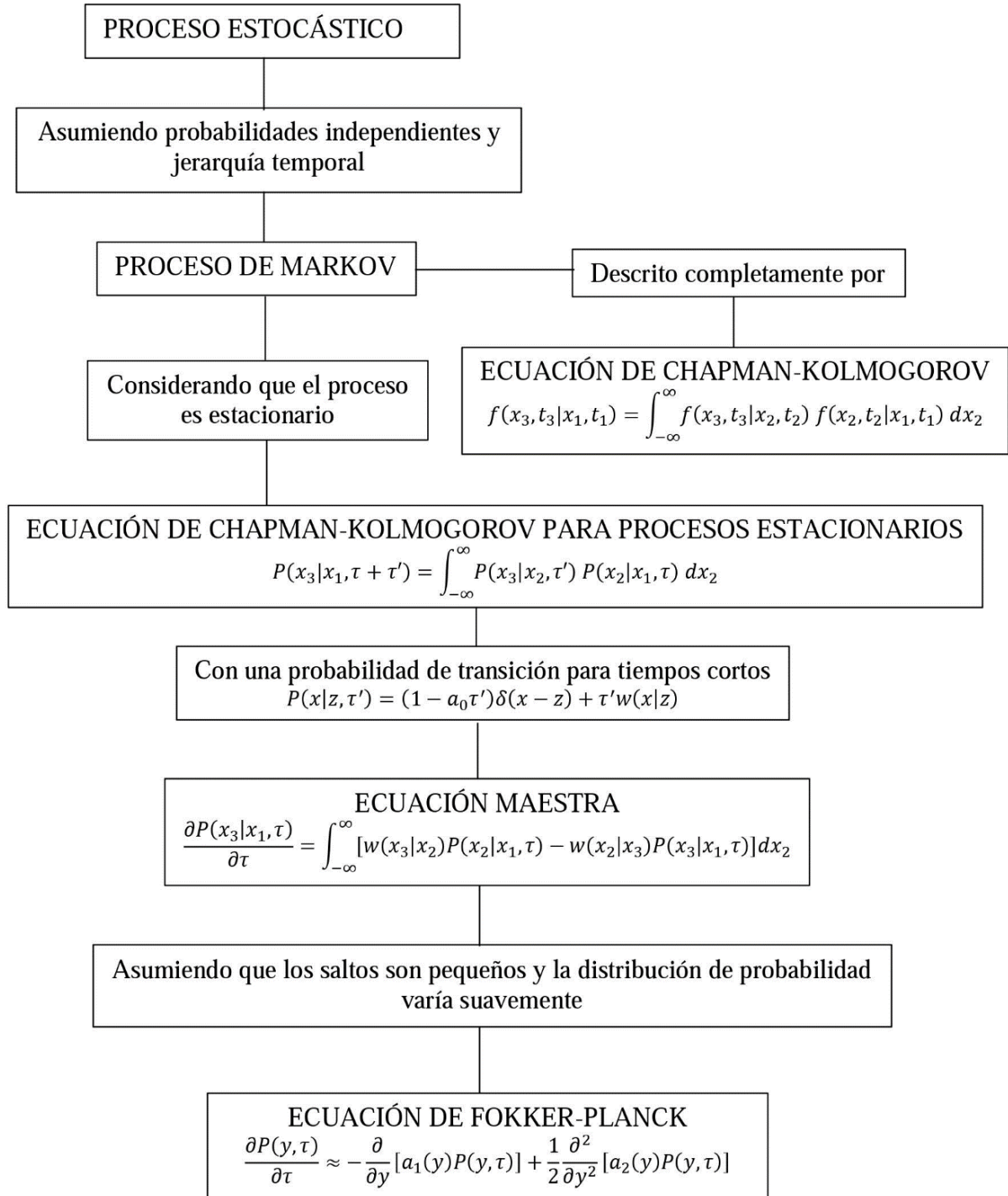
$$P(y + \Delta y, \tau) \approx P(y, \tau) \text{ para } |\Delta y| < \delta$$

Lo anterior implica que existen también pequeños saltos en la probabilidad de transición entre un estado y otro; esto quiere decir que se considera que la ecuación tiene un carácter determinista a pesar de poseer también un nivel de aleatoriedad. Este aspecto se ve reflejado en la forma de la ecuación; los dos primeros sumandos representan el aspecto determinista, llamado término convectivo, mientras el tercero representa el aspecto aleatorio por medio del término de fluctuación.

Para la obtención de la ecuación se hizo una expansión en series de Taylor hasta el segundo término, siendo el primer término el convectivo y el segundo, el de fluctuación. Esta expansión se hizo bajo las consideraciones del párrafo anterior. Todas estas consideraciones llevan a que la variable dependiente se trate como una función continua mientras las probabilidades de transición son discretas; esto ha hecho de la ecuación de Fokker-Planck una ecuación criticada como no consistente, según lo expresa Van Kampen [21]. Aún así, la ecuación ha demostrado ser útil para describir procesos estocásticos en muchas áreas de la ciencia.

### 2.4.9 Resumen de procesos de Markov

Figura 2-1: Resumen de procesos de Markov (traducción del inglés) [14, p. 127]



A manera de conclusión del autor: la ecuación de Fokker-Planck se deriva de un tipo de proceso estocástico llamado proceso de Markov, que se caracteriza porque las probabilidades para los estados tienen una jerarquía temporal y una probabilidad sólo está condicionada a la inmediatamente anterior (esto hace que el proceso no posea memoria). Se considera que durante el paso de un estado a otro transcurre un tiempo igual para todas las transiciones y que sólo después de este tiempo el sistema entra en equilibrio por lo que el proceso es estacionario. Aunque las probabilidades de transición son discretas, se considera que la distribución de probabilidad tiene una variación suave con el tiempo. Todas estas consideraciones sugieren entonces que la ecuación de Fokker-Planck es determinista, pero su carácter discreto y no determinista para tiempos menores al de transición entre subestados hacen pensar que la información que brinda no es confiable para tiempos menores al tiempo de transición. En la Figura 2-1 se esquematiza el proceso de obtención de la ecuación de Fokker-Planck desde el numeral 4-5 hasta aquí.

## 2.5 Método de grupos de Lie para solución de ecuaciones diferenciales

Este método fue nombrado así por A. Tresse [22] en honor a Sophus Lie, quien fundó las bases de la teoría de grupos de transformaciones continuas. Pertenece al área de topología y considera aspectos de la geometría diferencial y de la teoría de grupos; consiste en encontrar un grupo de transformadas simétricas para las variables de la ecuación, es decir, que no cambien la forma de la ecuación al transformarla y usar estas simetrías para encontrar soluciones analíticas particulares. A continuación se listan las definiciones necesarias para entender el método.

*Conjunto ordenado:* Es una colección de elementos con una organización jerárquica, es decir; sean  $x$  y  $y$  dos elementos de un conjunto, entonces  $x \leq y$  o  $y \leq x$

*Función o Mapa:* Regla que relaciona elementos de conjuntos diferentes

*Objeto:* Elemento de un conjunto o el conjunto mismo

*Clase:* Conjunto de objetos y mapas que relacionan a estos objetos entre sí

*Espacio topológico:* Conjunto ordenado de elementos individuales, parejas o n-tuplas en el que se pueden definir familias de subconjuntos abiertos cuya unión contiene al propio espacio topológico, a la unión de subconjuntos y las intersecciones.

*Grupo:* Es un espacio topológico en el que está definida además, una operación producto cartesiano entre los elementos, que cumple con las leyes de identidad, inversa y asociativa.

*Homeomorfismo:* Propiedad de un mapa que consiste en que la inversa del mapa devuelve la operación de relación entre los elementos: sea  $a \in A$  y  $b \in B$  y sea  $g$  un mapa que relaciona a cada elemento de  $A$  con un elemento de  $B$ , el mapa será homeomorfo si siendo  $g(a) = b$ , entonces  $g^{-1}(b) = a$

*n-variedad:* Espacio topológico en el que se pueden definir dos conjuntos abiertos alrededor de dos elementos diferentes que no se traslapen. Un ejemplo es la recta numérica

*Grupo de Lie:* Es un espacio topológico con las siguientes características:

- a. Es un grupo
- b. Posee un mapa continuo con inversa e identidad
- c. Alrededor de cada elemento del espacio se puede definir un espacio abierto que contenga al propio elemento y que es homeomorfo al espacio euclidiano  $R^n$
- d. El mapa es diferenciable

*Grupo de simetría:* Conjunto de transformadas u operaciones geométricas que dejan invariante cierta entidad geométrica o física.

El objetivo del método es construir un espacio topológico (grupo de Lie) para la ecuación diferencial y buscar transformadas (mapas) para esta ecuación, que sean simétricas, diferenciables y posean inversa, de tal forma que se pueda resolver de manera sencilla la ecuación transformada. Como los mapas son simétricos, la solución de la ecuación transformada es la solución de la ecuación original. El método consiste en construir un hiperespacio de tantas dimensiones como variables y derivadas tenga la ecuación diferencial, donde ella sea una hipersuperficie sobre la que se trazan curvas, de forma similar a las curvas de nivel usadas en Topografía para la caracterización del relieve. Estas

curvas se construyen a través de dos tipos de funciones: un conjunto de funciones llamadas coeficientes infinitesimales que describen cada uno el tamaño del “paso” sobre el eje de cada variable dependiente e independiente y un conjunto de campos vectoriales llamados generadores de simetrías, que indican la dirección que se debe tomar para construir la curva. El criterio utilizado para encontrar sólo aquellas soluciones simétricas sobre estas curvas es llamado criterio de simetría.

### 2.5.1 Descripción del método

Si se considera la ecuación diferencial sencilla

$$\frac{dy}{dx} = g(x)$$

y se soluciona por medio de una integral simple

$$y = G(x) + \lambda$$

Donde  $\lambda$  es la constante de integración. Esto quiere decir que existen tantas soluciones a la ecuación como valores tome  $\lambda$ . Esta constante o parámetro convierte la solución de la ecuación en nuevas soluciones y su aplicación a la variable  $y$  es simétrica debido a que no cambia la forma de la ecuación. Este tipo de transformación es el que se busca en este método, para todas las variables de la ecuación a tratar, es decir; se busca un mapa para cada variable, que sea expresable, cada uno de ellos en función del mismo parámetro. A continuación se describe paso a paso el algoritmo usado para encontrar el grupo de Lie y las soluciones a la ecuación. Este algoritmo es una síntesis de la revisión bibliográfica realizada a los trabajos de Olver [23], Oliveri [24] y Ortiz, Jiménez, y Posso [25], de donde se extrajeron los conceptos y formulaciones que vienen a continuación.

- 1) Escribir la ecuación diferencial en la forma

$$\Delta_v \left( x_1, \dots, x_p, u_1^{(n)}, \dots, u_q^{(n)} \right) = 0$$

Donde  $x_1, \dots, x_p$  son las variables independientes y  $u_1^{(n)}, \dots, u_q^{(n)}$  son las dependientes. El superíndice  $(n)$  indica algún orden de derivada respecto a las variables independientes;



esta notación obedece al hecho de que en una ecuación diferencial, las variables dependientes están expresadas en función de sus derivadas. De ahora en adelante, a cada derivada  $u_q^{(n)}$  se le tomará como una variable más y se le llamará  $u$ , lo que hace posible interpretar la ecuación anterior como una superficie en un espacio métrico.

2) Asignar a cada variable dependiente e independiente un generador infinitesimal

$$\xi^i(x_i) = \frac{\partial X(x_i; \lambda)}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda=0}$$

$$\varphi^q(u_q) = \frac{\partial Y(u_q; \lambda)}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda=0}$$

El fundamento para los dos pasos anteriores se expone a continuación: El tipo de transformaciones buscadas tienen las siguientes características

a. Sea  $P_\lambda$  la transformada que convierte a  $X$  en  $X^*$

$$P_\lambda; R^n \rightarrow R^n$$

$$X \rightarrow X(x; \lambda) = X^*$$

la transformada es uno a uno.

b. Las transformaciones son aditivas; una doble transformada se puede expresar como una única transformada cuyo parámetro es la suma de los otros dos

$$X(X(x; \lambda), \lambda_2) = X(x; \lambda_1 + \lambda_2)$$

c. La transformada posee identidad (adición de cero)

$$X(x; 0) = X$$

d. Para cada parámetro existe uno y sólo uno que devuelve la transformada (inversa)

$$X(X(x; \lambda), \lambda_2) = X(x; 0) = X$$

- e.  $\lambda$  es un parámetro que varía de manera continua.
- f.  $X$  es infinitamente diferenciable respecto a  $x$  y analítica respecto a  $\lambda$ .
- g. La adición de parámetros es analítica.

Teniendo en cuenta estas características para las transformadas  $X^* = X + \lambda$ , es posible expandir en series de Taylor alrededor de  $\lambda = 0$  para obtener una transformada infinitesimal

$$X^* = X + \lambda \left( \frac{\partial X(x; \lambda)}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda=0} \right) + \frac{1}{2} \lambda^2 \left( \frac{\partial^2 X(x; \lambda)}{\partial \lambda^2} \Big|_{\lambda=0} \right) + \dots$$

En  $R^2$  se tiene

$$X^* = X + \lambda \left( \frac{\partial X(x, y; \lambda)}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda=0} \right) + O(\lambda^2)$$

Se puede definir entonces la derivada infinitesimal de la siguiente manera

$$\xi(x) = \frac{\partial X(x; \lambda)}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda=0}; \quad \xi(x, y) = \frac{\partial X(x, y; \lambda)}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda=0}$$

Haciendo lo mismo para las variables dependientes

$$\varphi(u) = \frac{\partial Y(u; \lambda)}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda=0}; \quad \varphi(x, u) = \frac{\partial Y(x, u; \lambda)}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda=0}$$

De esta forma, el grupo de transformaciones infinitesimales para  $q$  variables dependientes y  $p$  independientes se abrevia así

$$x_i^* = x_i + \lambda \xi^i(x_1, \dots, x_p, u_1, \dots, u_q)$$

$$u_\alpha^* = u_\alpha + \lambda \varphi^\alpha(x_1, \dots, x_p, u_1, \dots, u_q)$$

Los términos  $\xi$  y  $\varphi$  son llamados coeficientes infinitesimales del grupo de transformaciones. Es necesario aclarar que existe un coeficiente por cada variable y que a su vez cada coeficiente depende de todas las variables del problema.

Entonces, si es posible expresar la ecuación diferencial de la forma que indica el paso 1, la ecuación transformada tendrá la forma siguiente

$$\Delta_v(x_1 + \lambda \xi^1, \dots, x_p + \lambda \xi^p, u_1 + \lambda \varphi^1, \dots, u_q + \lambda \varphi^q) = \Delta_v(x_1, \dots, x_p, u_1, \dots, u_q) + \lambda \left( \xi^1 \frac{\partial}{\partial x_1} + \dots + \xi^p \frac{\partial}{\partial x_p} + \varphi^1 \frac{\partial}{\partial u_1} + \dots + \varphi^q \frac{\partial}{\partial u_q} \right) \Delta_v(x_1, \dots, x_p, u_1, \dots, u_q) = 0$$

De la ecuación anterior, y teniendo en cuenta el paso 1, se llega a que el problema tiene dos ecuaciones simultáneas:

$$\Delta_v(x_1, \dots, x_p, u_1, \dots, u_q) = 0 \quad (2.22)$$

$$\left( \xi^1 \frac{\partial}{\partial x_1} + \dots + \xi^p \frac{\partial}{\partial x_p} + \varphi^1 \frac{\partial}{\partial u_1} + \dots + \varphi^q \frac{\partial}{\partial u_q} \right) \Delta_v(x_1, \dots, x_p, u_1, \dots, u_q) = 0 \quad (2.23)$$

La ecuación 2.22 es la ecuación diferencial original y la 2.23 es una ecuación diferencial que contiene todas las restricciones hechas a las transformadas; El operador diferencial de la ecuación 2.23 que es llamado generador infinitesimal de simetrías, contiene toda la información necesaria para que el conjunto de transformadas sea un grupo de Lie, porque resultó de hacer todas las consideraciones de los literales (a) al (g). La solución del problema ahora consiste en resolver este sistema de ecuaciones. Para ecuaciones diferenciales sencillas de primer orden, en las que se puede despejar la derivada de la variable dependiente que llamamos  $u$ , el método consiste en introducir la expresión de  $u$  en la ecuación 2.23 y aplicar el operador. El resultado será una ecuación diferencial en las variables  $\xi$  y  $\varphi$  como coeficientes de diferentes términos que son las variables  $u$ , es decir; derivadas de la variable dependiente. La matriz de coeficientes de dicha ecuación formará un sistema de ecuaciones diferenciales simultáneas de donde se obtienen los coeficientes infinitesimales  $\xi$  y  $\varphi$  que introducidos en el operador diferencial de la ecuación 2.23, forman en conjunto un álgebra de Lie.

Ecuaciones diferenciales más complejas como la de la onda de choque tienen el inconveniente de poseer varias derivadas de diferentes órdenes y ser además, no lineales, lo que no hace posible despejar una derivada sin que siga implícita la variable dependiente y las otras derivadas. En estos casos, resolver las ecuaciones 2.22 y 2.23 requiere primero un tratamiento especial sobre el generador infinitesimal, para extender su acción a

derivadas de orden superior según el orden de la ecuación original y requiere también de la aplicación de un criterio de simetría que se explicará en el paso 4.

- 3) Una vez se le asigne un coeficiente infinitesimal a cada variable, encontrar la expresión para el generador infinitesimal

$$V = \sum_{i=1}^p \xi^i \frac{\partial}{\partial x_i} + \sum_{\alpha=1}^q \varphi^\alpha \frac{\partial}{\partial u_\alpha}$$

- 4) Encontrar la expresión matemática para el criterio de simetría aplicado a la ecuación a resolver.

El paso 4 requiere aclarar en qué consiste el criterio de simetría y qué es una prolongación de un campo vectorial, así que a continuación se da una explicación de estos dos conceptos.

Una prolongación es una extensión de un elemento en un espacio más grande que el espacio inicial en el que existía. En otras palabras, si se considera una función

$$F(x, y, u) = 0$$

Donde  $u$  es la variable dependiente, esta función existe en un espacio  $M \in R^3$ . Una prolongación de esta función involucra además de las tres variables originales, las derivadas de la variable dependiente respecto a las independientes, donde el grado de la prolongación es el grado de la derivada mayor. Así, la primera prolongación de  $F$  es

$$Pr^1 F(x, y, u) = F(x, y, u, u_x, u_y)$$

El espacio de la función prolongada posee dos dimensiones más, siendo el espacio inicial un subespacio del prolongado y la función original es una superficie en el subespacio. Una segunda prolongación de  $F$  es

$$Pr^2 F(x, y, u) = F(x, y, u, u_x, u_y, u_{xx}, u_{yy}, u_{xy})$$

Se dijo antes que el objetivo del método es encontrar el grupo de simetría que transforma las variables de la ecuación dejando invariante a la misma ecuación. Es necesario indicar que la variable dependiente se encuentra en forma de derivada, por lo que es útil que el grupo de simetría también transforme las derivadas, con lo cual sería necesario encontrar su prolongación. Teniendo en cuenta que el generador infinitesimal posee toda la información necesaria para encontrar el grupo, es tentador pensar en la posibilidad de que la prolongación del generador brinde todo lo necesario para encontrar el grupo prolongado. Es esto lo que expresa el criterio de simetría, a través del siguiente enunciado: Un grupo de transformaciones es simétrico si se cumple que la prolongación del generador, de grado igual al grado de la ecuación, aplicada a la ecuación es cero.

$$Pr^n V(\Delta_v) = 0, \text{ siempre que } \Delta_v = 0$$

La forma general de la prolongación del generador es la siguiente

$$Pr^n V = \sum_{i=1}^p \xi^i(x, u) \frac{\partial}{\partial x_i} + \sum_{\alpha=1}^q \varphi^\alpha(x, u) \frac{\partial}{\partial u_\alpha} + \sum_{\alpha=1}^q \sum_{J \leq n} \varphi^{\alpha, J}(x, u, u^n) \frac{\partial}{\partial u_J^\alpha} \quad (2.24)$$

Donde  $J$  representa una derivada respecto a una o más variables independientes y puesto como subíndice indica que la variable está derivada. El término  $\varphi^{\alpha, J}$  es

$$\varphi^{\alpha, J} = D_J Q^\alpha + \sum_{i=1}^p \xi^i(x, u) u_{J, i}^\alpha \quad (2.25)$$

Donde  $D_J$  indica derivada total respecto a lo que indica  $J$ . El término  $Q^\alpha$ , conocido como "ecuación característica del campo vectorial  $V$ " tiene la forma

$$Q^\alpha(x, u^1) = \varphi^\alpha(x, u) - \sum_{i=1}^p \xi^i(x, u) \frac{\partial u^\alpha}{\partial x_i} \quad (2.26)$$

La demostración de las ecuaciones 2.24 a 2.26 se encuentra descrita de forma detallada en [23]

- 5) Encontrar los términos  $\varphi^{\alpha, J}$  y  $Q^\alpha(x, u^1)$  y reemplazarlos en la expresión para el criterio de simetría. En este punto se obtendrá una ecuación diferencial, cuya matriz

de coeficientes será un sistema de ecuaciones diferenciales cuyas variables dependientes son los coeficientes infinitesimales  $\xi$  y  $\varphi$

- 6) Resolver el sistema de ecuaciones simultáneas del paso anterior. Con esto se encontrarán las expresiones para  $\xi$  y  $\varphi$  que son las funciones que describen el tamaño del “paso” para construir las curvas sobre la hipersuperficie. Estas funciones forman el grupo de simetría.
- 7) Encontrar el álgebra de simetría del problema. El álgebra de simetría es la expresión completa del campo vectorial o generador de simetría que resulta al reemplazar en él los coeficientes infinitesimales. Al hacer esto, resultará una expresión que es posible reacomodar según las constantes de integración que resultaron en el paso 6, de tal forma que para cada constante existe un campo vectorial que es en sí mismo un generador de simetrías, así que se obtiene un generador por cada constante de integración.
- 8) Encontrar soluciones invariantes. Uno de los teoremas relacionados con el uso de los grupos de Lie en la solución de ecuaciones diferenciales establece: Sea  $G$  un grupo local de transformaciones con generadores infinitesimales  $V_1, \dots, V_r$  y sean  $Q_1, \dots, Q_r$  las ecuaciones características asociadas a los generadores, entonces una función es  $G$ -invariante si y sólo si es una solución al sistema de ecuaciones diferenciales parciales de primer orden

$$Q_k^\alpha(x, u^1) = 0 \quad , \quad k = 1, \dots, r \quad , \quad \alpha = 1, \dots, q \quad (2.27)$$

Así que el grupo de soluciones invariantes de la ecuación diferencial original (ecuación de la onda de choque en este caso) son aquellas funciones que satisfacen tanto la ecuación original como el grupo de restricciones representado por las ecuaciones 2.27.

$$\Delta_v(x, u^{(n)}) = 0 \quad , \quad v = 1, \dots, m$$

$$Q_k^\alpha(x, u^1) = 0 \quad , \quad k = 1, \dots, r \quad , \quad \alpha = 1, \dots, q \quad (2.28)$$

Para encontrar las soluciones se escoge uno de los generadores infinitesimales o una combinación lineal de ellos y se toman aquellos coeficientes infinitesimales que contengan las mismas constantes que definen a cada generador (sólo se toman aquellos términos de los coeficientes que contengan dichas constantes). Luego se reemplazan los coeficientes en la ecuación característica del campo vectorial y se resuelve el sistema de ecuaciones 2.27. Usualmente el método de las características aplicado a la ecuación 2.27 brinda soluciones que reemplazadas en la ecuación original da lugar a soluciones invariantes particulares de dicha ecuación. Aún así, el sistema de ecuaciones 2.28 cambia según el generador usado y por lo tanto debe analizarse cada caso por separado.

### **2.5.2 Aspectos importantes sobre el grupo de transformaciones de Lie y su papel en la obtención de soluciones**

Hasta el momento se ha dicho que el método se basa en encontrar transformaciones bajo las cuales la ecuación diferencial sea invariante y dé lugar a obtener soluciones de la manera más sencilla posible. También se ha dicho que estas transformaciones se realizan sobre curvas contenidas en la hipersuperficie en la que se convierte la ecuación diferencial y que son rotaciones, traslaciones o escalamientos. Aún así, en la descripción del método no se hace referencia al grupo de transformaciones, ni se describen las curvas sobre las cuales se encuentran las soluciones. Lo anterior se debe a que en realidad el campo vectorial o generador de simetría y los coeficientes infinitesimales contienen toda la información necesaria para encontrar soluciones a la ecuación y por lo tanto no se hace necesario encontrar las curvas sobre la hipersuperficie, que son en realidad el mismo conjunto de transformadas. Por otro lado, no existe una única forma de encontrar soluciones por este método; en este trabajo se emplea una de ellas, conocida como la manera clásica para obtener soluciones invariantes, que consiste en emplear el teorema del paso 8 del numeral anterior. El uso de este teorema hace posible obtener soluciones sin emplear el conjunto de transformadas, debido a que se emplea en su lugar la ecuación característica del campo vectorial. Otras maneras de obtener soluciones son por ejemplo el empleo del teorema Noether o el uso del grupo de transformadas aplicado a una solución ya conocida, lo que da lugar a nuevas soluciones. En el caso del uso del teorema Noether, las soluciones que se obtienen son simetrías del problema, es decir, leyes de conservación. En el presente trabajo no se emplean ninguno de estos dos métodos, aunque a continuación se hace una descripción sobre cómo obtener el grupo de

transformadas o grupo de Lie, tal como se encuentra en [23], sólo para indicar cómo se obtienen las expresiones que le dan nombre al método.

En primer lugar, considérese las propiedades expresadas en los literales (a) a (g) del paso 2 para las transformadas; existe una función que cumple con todas estas propiedades, la función exponencial natural

$$\psi(\lambda, x) = \exp(\lambda V)x$$

En la ecuación anterior  $\psi$  representa la transformada de Lie o lo que es lo mismo, la curva sobre la hipersuperficie donde existen soluciones invariantes.  $\lambda$  Es el parámetro de la transformada, que se debe encontrar alrededor de la identidad (ver explicación en el paso 2 del numeral 2.5.1  $V$  es alguno de los generadores de simetría y  $x$  es la variable independiente sobre la cual se quiere obtener la transformada.

La propiedad aditiva se cumple como se expresa a continuación: sea un par de transformaciones sobre la variable  $x$

$$\psi_1(\lambda, x) = \exp(\lambda V)x$$

$$\psi_2(\delta, x) = \exp(\delta V)x$$

La doble transformada se puede expresar como una única transformada respecto al parámetro  $\lambda + \delta$

$$\psi_{1-2}(\lambda, x) = \exp(\lambda V)\exp(\delta V)x = \exp[(\lambda + \delta)V]$$

La existencia del elemento identidad se cumple también, como se ve enseguida

$$\exp[(0)V]x = x$$

Por otro lado, esta función es continua, diferenciable y posee inversa. Todo lo anterior justifica su uso para encontrar las transformadas de Lie. El procedimiento se aclara a continuación a través de un ejemplo.



Suponga que el generador de simetrías es  $V = x \frac{\partial}{\partial t}$  y que las variables del problema son  $x$ ,  $t$  y  $\rho$ , de tal forma que la transformada  $\psi$  será como a continuación.

$$\psi(\lambda, x, t, \rho) = (x, t, \rho) \exp\left(\lambda x \frac{\partial}{\partial t}\right)$$

Una expansión en series de Taylor para la exponencial natural, obviando los términos superiores para  $\lambda$  alrededor del punto cero da como resultado la transformación invariante buscada.

$$\psi(\lambda, x, t, \rho) = (x, t, \rho) \left(1 + \lambda x \frac{\partial}{\partial t}\right) = (x, t + \lambda x, \rho)$$

Este método para encontrar las transformaciones de simetría es llamado exponenciación y aplicado a todos los generadores de simetría proporciona un grupo de transformaciones llamado grupo de Lie.

### 2.5.3 Ejemplo de uso: ecuación de difusión para partículas no interactuantes

Con el fin de aclarar en qué consiste el método de grupos de Lie para la solución de ecuaciones diferenciales, se presenta a continuación su aplicación a la solución de la ecuación de difusión para partículas no interactuantes, ecuación 2.29, que es un caso especial de la ecuación de Fokker-Planck, usando el paso a paso indicado en el numeral 2.5.1. Esta ecuación tiene una solución ya conocida, ecuación 2.30, que fue encontrada por Albert Einstein [26].

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \quad (2.29)$$

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) \quad (2.30)$$

Aquí la densidad de partículas es dependiente del tiempo y de la posición.  $D$  es la constante de difusión.

- 1) Llevar la ecuación a la forma

$$\Delta_v(x_1, \dots, x_p, u_1^{(n)}, \dots, u_q^{(n)}) = 0$$

Para este caso

$$D\rho_{xx} - \rho_t = 0 \quad (2.31)$$

Esta ecuación se tratará como una hipersuperficie en un espacio de seis dimensiones; dos para cada una de las variables independientes  $x$  y  $t$ , una para la variable dependiente  $\rho$ , dos más para cada una de las derivadas  $\rho_{xx}$  y  $\rho_t$ , y una para la función completa  $\Delta_v = 0$ , siendo así este caso el de una hipersuperficie de cinco dimensiones en un espacio de seis dimensiones.

- 2) Asignar un generador infinitesimal a cada variable de la ecuación:  $\xi(x, t, \rho)$  asociado a  $x$ ,  $\eta(x, t, \rho)$  asociado a  $t$  y  $\varphi(x, t, \rho)$  asociado a  $\rho$ .
- 3) Encontrar la expresión general para el generador infinitesimal de simetrías:

$$V = \xi(x, t, \rho) \frac{\partial}{\partial x} + \eta(x, t, \rho) \frac{\partial}{\partial t} + \varphi(x, t, \rho) \frac{\partial}{\partial \rho} \quad (2.32)$$

- 4) Encontrar la expresión matemática del criterio de simetría:

Para esto se busca primero la segunda prolongación del generador de simetrías, ecuación 2.24.

$$Pr^2V = \xi \frac{\partial}{\partial x} + \eta \frac{\partial}{\partial t} + \varphi \frac{\partial}{\partial \rho} + \varphi^x \frac{\partial}{\partial \rho_x} + \varphi^t \frac{\partial}{\partial \rho_t} + \varphi^{xx} \frac{\partial}{\partial \rho_{xx}} + \varphi^{tt} \frac{\partial}{\partial \rho_{tt}} + \varphi^{xt} \frac{\partial}{\partial \rho_{xt}}$$

$$(2.33)$$

Y se aplica el criterio de simetría  $Pr^n V(\Delta_v) = 0$

$$\left( \xi \frac{\partial}{\partial x} + \eta \frac{\partial}{\partial t} + \varphi \frac{\partial}{\partial \rho} + \varphi^x \frac{\partial}{\partial \rho_x} + \varphi^t \frac{\partial}{\partial \rho_t} + \varphi^{xx} \frac{\partial}{\partial \rho_{xx}} + \varphi^{tt} \frac{\partial}{\partial \rho_{tt}} + \varphi^{xt} \frac{\partial}{\partial \rho_{xt}} \right) (D\rho_{xx} - \rho_t) = 0$$

Como resultado se obtiene la expresión matemática del criterio de simetría para la ecuación de difusión.

$$D\varphi^{xx} - \varphi^t = 0 \quad (2.34)$$

Nótese que en la expresión de la segunda prolongación se considera la ecuación como una hipersuperficie de cinco dimensiones, al tratar las derivadas de la variable dependiente como dos variables más del problema; esto es notorio en la expresión de las derivadas que acompañan a los coeficientes infinitesimales  $\varphi^i$

- 5) Encontrar los términos  $\varphi^{\alpha,J}$ , reemplazarlos en la ecuación del criterio de simetría, ecuación 2.34 y obtener el conjunto de ecuaciones diferenciales acopladas para los coeficientes infinitesimales  $\xi$ ,  $\eta$  y  $\varphi$ . De las ecuaciones 2.25 y 2.26 se deducen las siguientes expresiones

$$\begin{aligned} \varphi^t &= D_t Q + \xi \rho_{tx} + \eta \rho_{tt} \\ \varphi^{xx} &= D_{xx} Q + \xi \rho_{xxx} + \eta \rho_{xxt} \\ Q &= \varphi - \xi \rho_x - \eta \rho_t \end{aligned} \quad (2.35)$$

La ecuación 2.35 o ecuación característica del generador de simetrías va a ser muy importante en los pasos subsiguientes para encontrar soluciones invariantes. Por lo pronto, su expresión general se puede reemplazar en las ecuaciones para  $\varphi^t$  y  $\varphi^{xx}$ , recordando además que  $D_J$  representa una derivada total.

$$\begin{aligned} \varphi^t &= \frac{d}{dt} [\varphi - \xi \rho_x - \eta \rho_t] + \xi \rho_{tx} + \eta \rho_{tt} \\ \varphi^{xx} &= \frac{d^2}{dx^2} [\varphi - \xi \rho_x - \eta \rho_t] + \xi \rho_{xxx} + \eta \rho_{xxt} \end{aligned}$$

Efectuando ahora las derivadas se llega a las siguientes expresiones

$$\varphi^t = \varphi_\rho \rho_t + \varphi_t - \xi_\rho \rho_t \rho_x - \xi_t \rho_x - \eta_\rho \rho_t^2 - \eta_t \rho_t \quad (2.36)$$

$$\begin{aligned} \varphi^{xx} &= \rho_{xx} \varphi_\rho + \rho_x^2 \varphi_{\rho\rho} + 2\rho_x \varphi_{\rho x} + \varphi_{xx} - \rho_{xx} \rho_x \xi_\rho - 2\rho_{xx} \xi_x - \rho_{xx} \rho_x 2\xi_\rho - \rho_x^3 \xi_{\rho\rho} - 2\rho_x^2 \xi_{x\rho} - \\ &\quad \rho_x \xi_{xx} - 2\rho_{xt} \rho_x \eta_\rho - 2\rho_{xt} \eta_x - \rho_{xx} \rho_t \eta_\rho - \rho_x^2 \rho_t \eta_{\rho\rho} - 2\rho_x \rho_t \eta_{x\rho} - \rho_t \eta_{xx} \end{aligned} \quad (2.37)$$

Si se reemplazan las expresiones 2.36 y 2.37 en el criterio de simetría, ecuación 2.34 y se reemplazan los términos  $\rho_{xx}$  por  $\rho_{xx} = \frac{1}{D}\rho_t$ , su equivalente según la ecuación de difusión, ecuación 2.31, se obtiene la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned} & -2\rho_t\xi_x + D\rho_x^2(\varphi_{\rho\rho} - 2\xi_{x\rho}) + D\rho_x(2\varphi_{x\rho} - \xi_{xx}) - 3\rho_x\rho_t\xi_\rho - D\rho_x^3\xi_{\rho\rho} - 2D\rho_{xt}\rho_x\eta_\rho \\ & - 2D\rho_{xt}\eta_x - \rho_t^2\eta_\rho - D\rho_x^2\rho_t\eta_{\rho\rho} - 2D\rho_x\rho_t\eta_{x\rho} - D\rho_t\eta_{xx} - \varphi_t + \rho_x\rho_t\xi_\rho + \rho_x\xi_t \\ & + \rho_t^2\eta_\rho + \rho_t\eta_t = 0 \end{aligned}$$

La forma más general de resolver la ecuación anterior consiste en no poner ninguna restricción sobre los monomios  $\rho_i$ . En vez de esto, las restricciones recaen sobre los coeficientes infinitesimales. De esta forma cada término que acompaña a los monomios debe ser cero, con lo que se obtiene un conjunto de ecuaciones diferenciales acopladas para los coeficientes infinitesimales.

**Tabla 2-1:** Sistema de ecuaciones acopladas para coeficientes infinitesimales. Ecuación de difusión

Monomio	Coficiente
$\rho_t$	$-2\xi_x - D\eta_{xx} + \eta_t = 0$
$\rho_x^2$	$\varphi_{\rho\rho} - 2\xi_{x\rho} = 0$
$\rho_x$	$2D\varphi_{x\rho} - D\xi_{xx} + \xi_t = 0$
$\rho_x\rho_t$	$-3\xi_\rho - 2D\eta_{x\rho} + \xi_\rho = 0$
$\rho_x^3$	$\xi_{\rho\rho} = 0$
$\rho_{xt}\rho_x$	$\eta_\rho = 0$
$\rho_{xt}$	$\eta_x = 0$
$\rho_t^2$	0

Monomio	Coficiente
$\rho_x^2 \rho_t$	$\eta_{\rho\rho} = 0$
1	$\varphi_t = 0$

**Tabla 2-1:** (continuación)

- 6) Ahora se resuelve el conjunto de ecuaciones diferenciales acopladas para encontrar los coeficientes infinitesimales. Por un simple análisis de las ecuaciones se puede deducir que el coeficiente  $\eta$  sólo depende de la variable temporal,  $\xi$  sólo depende de la posición y el tiempo y  $\varphi$  de la densidad y la posición, de tal forma que el sistema de ecuaciones se simplifica a las tres ecuaciones siguientes:

$$\begin{aligned} -2\xi_x + \eta_t &= 0 \\ \varphi_{\rho\rho} &= 0 \\ 2D\varphi_{x\rho} - D\xi_{xx} + \xi_t &= 0 \end{aligned}$$

La solución de estas tres ecuaciones son las expresiones de los coeficientes infinitesimales en función de las variables originales de la ecuación de difusión. Cada uno de los coeficientes infinitesimales expresa el tamaño de cada paso para construir las curvas sobre las cuales se buscarán las soluciones invariantes.

$$\eta = -2Da_1t^2 + 2a_2t + a_4 \quad (2.38)$$

$$\xi = -2Da_1xt - 2Da_3t + a_2x + a_5 \quad (2.39)$$

$$\varphi = \frac{a_1\rho}{2}x^2 + a_3\rho x + a_6\rho + a_7g(x) + a_8 \quad (2.40)$$

- 7) A continuación se obtiene el álgebra de simetría, reemplazando las ecuaciones 2.38, 2.39 y 2.40 en la expresión general para el generador de simetrías ecuación 2.32.

$$V = a_1 \left( -2xt \frac{\partial}{\partial x} - 2Dt^2 \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\rho x^2}{2} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + a_2 \left( x \frac{\partial}{\partial x} + 2t \frac{\partial}{\partial t} \right) + a_3 \left( -2Dt \frac{\partial}{\partial x} + \rho x \frac{\partial}{\partial \rho} \right) \\ + a_4 \frac{\partial}{\partial t} + a_5 \frac{\partial}{\partial x} + a_6 \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + a_7 g(x) \frac{\partial}{\partial \rho} + a_8 \frac{\partial}{\partial \rho}$$

- 8) Buscar soluciones invariantes. En el paso 8 del numeral 2.5.1 se dijo que una solución es invariante si es solución del sistema de ecuaciones 2.28 y también se sabe que un campo vectorial correspondiente a cada una de las constantes es en sí mismo un generador de simetrías y que con cada uno de ellos o una combinación lineal de ellos se obtienen soluciones a la ecuación diferencial, que en este caso es la ecuación de difusión. Se decide usar el campo vectorial correspondiente a la constante  $a_3$ , así que el campo y los coeficientes infinitesimales que se emplean son los que corresponden a esta constante.

$$V = -2Dt \frac{\partial}{\partial x} + \rho x \frac{\partial}{\partial \rho}$$

$$\xi = -2Da_3t$$

$$\eta = 0$$

$$\varphi = \rho x a_3$$

Así que la ecuación característica asociada a este generador, ecuación 2.35 es

$$Q = a_3 \rho x + 2Da_3t \frac{\partial \rho}{\partial x}$$

Y el sistema a resolver para obtener soluciones invariantes es

$$a_3 \rho x + 2Da_3t \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0 \quad (2.41)$$

$$D\rho_{xx} - \rho_t = 0 \quad (2.42)$$

El procedimiento a seguir es resolver la ecuación 2.41 mediante la parametrización de la función  $\rho$ ; el resultado se podrá usar como una nueva variable para sustituir en la ecuación 2.42, cuya solución se espera sea la misma ecuación encontrada por Albert Einstein, ecuación 2.30. Entonces, parametrizando y derivando  $\rho$  respecto al parámetro, para resolver la ecuación 2.41.

$$\frac{\partial \rho}{\partial \beta} = \frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \beta} + \frac{\partial \rho}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial \beta}$$

Por comparación directa con la ecuación 2.41 se deducen las siguientes expresiones

$$\frac{\partial x}{\partial \beta} = 2Dt, \quad \frac{\partial \rho}{\partial \beta} = -\rho x, \quad \frac{\partial t}{\partial \beta} = 0$$

De donde se obtiene lo siguiente

$$-\frac{x dx}{2Dt} = \frac{d\rho}{\rho}$$

Integrando se llega a la ecuación

$$c_1 = \rho \exp\left(\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

El valor  $c_1$  o la constante de integración se toma ahora como una nueva variable dependiente " $\zeta$ ", mientras la expresión  $\frac{x^2}{t}$  se considera la nueva variable independiente " $y$ " para ser sustituidas en la ecuación 2.42

$$\zeta(y) = \rho \exp\left(\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

$$y = \frac{x^2}{t}$$

Ahora se procede efectuando las derivadas  $\rho_t$  y  $\rho_{xx}$

$$\rho_t = \zeta \left( -\frac{x^2}{4Dt^2} \right) \exp \left( -\frac{x^2}{4Dt} \right) + \frac{d\zeta}{dy} \left( -\frac{x^2}{t^2} \right) \exp \left( -\frac{x^2}{4Dt} \right)$$

$$\begin{aligned} \rho_{xx} = & \zeta \left( \frac{x^2}{4D^2t^2} - \frac{1}{2Dt} \right) \exp \left( -\frac{x^2}{4Dt} \right) + \frac{d\zeta}{dy} \left( \frac{2}{t} - \frac{x^2}{Dt^2} - \frac{2x^2}{2Dt^2} \right) \exp \left( -\frac{x^2}{4Dt} \right) \\ & + \frac{d^2\zeta}{dy^2} \left( \frac{4x^2}{t^2} \right) \exp \left( -\frac{x^2}{4Dt} \right) \end{aligned}$$

Reemplazando en la ecuación 2.42 y acomodando términos se obtiene una ecuación diferencial ordinaria homogénea de orden dos en las nuevas variables.

$$\frac{d^2\zeta}{dy^2} + \left( \frac{2Dt - x^2}{4Dx^2} \right) \frac{d\zeta}{dy} - \frac{t}{8Dx^2} \zeta = 0$$

Los coeficientes de esta ecuación son constantes, lo que hace posible resolverla por medio de una ecuación auxiliar que se muestra a continuación:

$$n^2 + \left( \frac{2Dt - x^2}{4Dx^2} \right) n - \frac{t}{8Dx^2} = 0$$

Las dos raíces de esta ecuación  $n_1$  y  $n_2$  son

$$n_1 = -\frac{t}{4x^2} + \frac{1}{4D}$$

$$n_2 = -\frac{3t}{4x^2}$$

Y la solución a la ecuación ordinaria es por lo tanto la siguiente:

$$\zeta = c_2 \exp \left[ \left( -\frac{t}{4x^2} + \frac{1}{4D} \right) y \right] + c_3 \exp \left[ \left( -\frac{3t}{4x^2} \right) y \right]$$

Ahora se devuelven las sustituciones hechas anteriormente  $y$  y  $\zeta$  para encontrar la solución  $\rho(x, t)$



$$\rho = c_2 \exp\left(-\frac{1}{4}\right) + c_3 \exp\left(-\frac{3}{2}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

Considerando  $c_2 = 0$  y absorbiendo el término  $\exp\left(-\frac{3}{2}\right)$  por la constante  $c_3$  se llega a la solución para  $\rho$

$$\rho = c_3 \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

Por último, se normaliza esta solución respecto a las velocidades. Esto se hace considerando que como distribución de probabilidad,  $\rho$  debe ser igual a la unidad, si se expresa la probabilidad para todas las velocidades; es decir, la probabilidad de que una partícula tenga cualquier velocidad es 1. Lo anterior se expresa matemáticamente mediante la integral de  $\rho$  para todo el espacio de velocidades.

$$c_3 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) dx = 1$$

La solución proporciona la expresión para  $c_3$

$$c_3 = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}$$

Y por último la solución normalizada da como resultado la expresión de la ecuación 2.43, que es la misma ecuación 2.30, solución para la ecuación de difusión para partículas no interactuantes.

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) \quad (2.43)$$

#### 2.5.4 Aplicación del método a un caso con solución analítica conocida: Oscilador armónico truncado

Con el fin de dar validez a este método para resolver ecuaciones de Fokker-Planck se analiza el caso de un oscilador armónico truncado: en primer lugar se plantea la ecuación de Fokker-Planck para el problema, se soluciona usando el método de grupos de Lie y se

contrasta con la solución proporcionada por Araujo y Drigo Filho [27], cuyo método consiste en crear una analogía entre la ecuación de Fokker-Planck para el oscilador y la ecuación de Schrödinger.

La formulación de la ecuación de Fokker-Planck para el oscilador armónico truncado tal como la expresan Araujo y Drigo Filho [27], es la siguiente:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [f'(x)P(x,t)] + D \frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2} \quad (2.44)$$

Aquí  $D$  es el coeficiente de difusión. La fuerza del oscilador dependiente de la posición está dada por

$$f'(x) = \begin{cases} 0, & -d > x \text{ y } x > d, \\ -kx, & -d \leq x \leq d, \end{cases}$$

Donde ( $d$ ) es el límite entre el potencial constante y el potencial armónico. Si se hace el reemplazo de esta fuerza en la ecuación 2.44, se obtienen dos ecuaciones:

$$\begin{cases} P_t + DP_{xx} = 0 & -d > x \text{ y } x > d, \\ DP_{xx} + kxP_x + kP - P_t = 0 & -d \leq x \leq d \end{cases} \quad (2.45)$$

La primera de estas ecuaciones es la ecuación de difusión para partículas no interactuantes que ya se resolvió anteriormente. La segunda se abordará a continuación usando el paso a paso indicado cuando se explicó el método de grupos de Lie (numeral 2.5.1)

- 1) Se parte de la ecuación de forma  $\Delta_v = 0$

$$DP_{xx} + kxP_x + kP - P_t = 0 \quad (2.46)$$

- 2) Los generadores infinitesimales de simetría para las variables de la ecuación se plantean a continuación:  $\xi(x,t,P)$  para la variable  $x$ ,  $\eta(x,t,P)$  para la variable  $t$  y  $\varphi(x,t,P)$  para la variable  $P$
- 3) La expresión general del generador de simetrías es:

$$V = \xi(x, t, \rho) \frac{\partial}{\partial x} + \eta(x, t, \rho) \frac{\partial}{\partial t} + \varphi(x, t, \rho) \frac{\partial}{\partial \rho} \quad (2.47)$$

4) Ahora se encuentra la segunda prolongación del generador de simetrías

$$Pr^2V = \xi \frac{\partial}{\partial x} + \eta \frac{\partial}{\partial t} + \varphi \frac{\partial}{\partial \rho} + \varphi^x \frac{\partial}{\partial \rho_x} + \varphi^t \frac{\partial}{\partial \rho_t} + \varphi^{xx} \frac{\partial}{\partial \rho_{xx}} + \varphi^{tt} \frac{\partial}{\partial \rho_{tt}} + \varphi^{xt} \frac{\partial}{\partial \rho_{xt}}$$

Y se reemplaza en el criterio de simetría  $Pr^nV(\Delta_v) = 0$  como se muestra a continuación

$$\left( \xi \frac{\partial}{\partial x} + \eta \frac{\partial}{\partial t} + \varphi \frac{\partial}{\partial \rho} + \varphi^x \frac{\partial}{\partial \rho_x} + \varphi^t \frac{\partial}{\partial \rho_t} + \varphi^{xx} \frac{\partial}{\partial \rho_{xx}} + \varphi^{tt} \frac{\partial}{\partial \rho_{tt}} + \varphi^{xt} \frac{\partial}{\partial \rho_{xt}} \right) (DP_{xx} + kxP_x + kP - P_t) = 0$$

Al aplicar al operador se obtiene la expresión matemática del criterio de simetría para la ecuación:

$$D\varphi^{xx} + k\xi P_x + k\varphi^x x + k\varphi - \varphi^t = 0 \quad (2.48)$$

5) Los términos  $\varphi^{\alpha,J}$  del criterio de simetría son los siguientes

$$\varphi^t = \varphi_P P_t + \varphi_t - \xi_P P_t P_x - \xi_t P_x - \eta_P P_t^2 - \eta_t P_t$$

$$\varphi^x = \varphi_P P_x + \varphi_x - \xi_P P_x^2 - \xi_x P_x - \eta_P P_t P_x - \eta_x P_t$$

$$\begin{aligned} \varphi^{xx} = & \varphi_P P_{xx} + \varphi_{PP} P_x^2 + 2\varphi_{Px} P_x + \varphi_{xx} - 3\xi_P P_x P_{xx} - 2\xi_x P_{xx} - \xi_{PP} P_x^3 - 2\xi_{Px} P_x^2 - \xi_{xx} P_x \\ & - 2\eta_P P_{xt} P_x - 2\eta_x P_{xt} - \eta_P P_t P_{xx} - \eta_{PP} P_t P_x^2 - 2\eta_{Px} P_t P_x - \eta_{xx} P_t \end{aligned}$$

De la ecuación original, ecuación 2.46, se despeja  $P_t$  y se reemplaza, junto con los términos  $\varphi^{\alpha,J}$  en la expresión matemática del criterio de simetría, ecuación 2.48. El grupo de ecuaciones diferenciales acopladas que resultan es el que se muestra a continuación.

**Tabla 2-2:** Sistema de ecuaciones acopladas para coeficientes infinitesimales. Oscilador armónico truncado

Monomio	Coefficiente
$P_x$	$k\xi - kx\xi_x + 2D\varphi_{Px} - D\xi_{xx} + \xi_t - k^2x^2\eta_x + kx\eta_t - Dkx\eta_{xx} = 0$
$P_x^2$	$D\varphi_{PP} - 2D\xi_{Px} - 2kxD\eta_{Px} = 0$
$P_xP$	$k^2x\eta_P + k\xi_P - 2kD\eta_{Px} = 0$
$P_xP_{xx}$	$-2D\xi_P - 2D^2\eta_{Px} = 0$
$P$	$-k^2x\eta_x - k\varphi_P + k\eta_t - kD\eta_{xx} = 0$
$P_{xx}$	$-kDx\eta_x + D\eta_t - D^2\eta_{xx} - 2D\xi_x = 0$
$P^2$	$k^2\eta_P = 0$
$PP_{xx}$	$kD\eta_P = 0$
$P_x^3$	$-D\xi_{PP} - kDx\eta_{PP} = 0$
$P_{xt}P_x$	$-2D\eta_P = 0$
$P_{xt}$	$-2D\eta_x = 0$
$PP_x^2$	$-kD\eta_{PP} = 0$
$P_x^2P_{xx}$	$D^2\eta_{PP} = 0$
1	$k\varphi + kx\varphi_x - \varphi_t + D\varphi_{xx} = 0$

## 6) Solución de las ecuaciones diferenciales acopladas

$$\xi = a_1 e^{-kt}$$

$$\eta = a_2$$

$$\varphi = a_3 g(x, t)$$

7) Álgebra de simetría

$$V = a_1 e^{-kt} \frac{\partial}{\partial x} + a_2 \frac{\partial}{\partial t} + a_3 g(x, t) \frac{\partial}{\partial P}$$

8) Solución invariante: Se escogen las constantes  $a_1$  y  $a_2$ , que equivale a escoger el generador de simetrías y los coeficientes infinitesimales siguientes:

$$V = a_1 e^{-kt} \frac{\partial}{\partial x} + a_2 \frac{\partial}{\partial t}$$

$$\xi = a_1 e^{-kt}$$

$$\eta = a_2$$

$$\varphi = 0$$

La ecuación característica asociada a este generador es la siguiente:

$$Q = -a_1 e^{-kt} P_x - a_2 P_t$$

Ahora la aplicación del criterio de simetría a la ecuación característica, junto con la ecuación del oscilador armónico truncado, ecuación 2.46, forman un sistema de dos ecuaciones diferenciales:

$$-a_1 e^{-kt} P_x - a_2 P_t = 0$$

$$DP_{xx} + kxP_x + kP - P_t = 0$$

De la primera de estas expresiones se despeja  $P_t$  para reemplazarlo en la segunda, lo que da lugar a una ecuación diferencial con variable independiente  $x$ :

$$DP_{xx} + (ae^{-kt} + kx)P_x + kP = 0$$

Donde  $a = \frac{a_1}{a_2}$

La solución de esta ecuación diferencial ordinaria de segundo orden posee parte real y parte imaginaria (ecuación 2.49), de donde se toma la parte real y se normaliza para la variable  $x$  (ecuación 2.50).

$$P(x, t) = c_1 e^{\frac{-x(kx+2ae^{-kt})}{2D}} + c_2 \sqrt{\frac{\pi}{2Dk}} e^{\frac{-ae^{-kt}}{2Dk}} e^{\frac{-x(kx+2ae^{-kt})}{2D}} \operatorname{Erf} \left[ \frac{kx+ae^{-kt}}{\sqrt{2Dk}} \right] i \quad (2.49)$$

$$P(x, t) = \sqrt{\frac{k}{2\pi D}} e^{\frac{-(kx+ae^{-kt})^2}{2Dk}} \quad (2.50)$$

El problema de Fokker-Planck para el oscilador armónico truncado tiene entonces la siguiente solución de Lie, según cada intervalo del rango:

$$P(x, t) = \begin{cases} \frac{N_1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{\frac{-x^2}{4Dt}}, & x < -d \\ N_2 \sqrt{\frac{k}{2\pi D}} e^{\frac{-(kx+ae^{-kt})^2}{2Dk}}, & -d \leq x \leq d \\ \frac{N_3}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{\frac{-x^2}{4Dt}}, & x > d \end{cases} \quad (2.51)$$

En la ecuación 2.51, las  $N_i$  son las expresiones de normalización respecto a  $x$ ; son dependientes del tiempo y debido a la simetría del problema se puede asegurar que  $N_1 = N_3$ , lo cual deja dos incógnitas  $N_1$  y  $N_2$  que se pueden encontrar haciendo uso de dos condiciones: la primera, que la solución es continua en todo el intervalo, es decir que ambas ecuaciones poseen el mismo valor en  $x = |d|$  y la segunda es la condición de normalización. Usando estas dos condiciones se llega a las expresiones 2.52 y 2.53.

$$N_1 = N_2 \sqrt{2kt} e^{\frac{-(kd+ae^{-kt})^2}{2Dk} + \frac{d^2}{4Dt}} \quad (2.52)$$

$$N_2 = \left\{ \sqrt{\frac{k}{2\pi D}} \left[ 2 e^{\frac{-(kd+ae^{-kt})^2}{2Dk} + \frac{d^2}{4Dt}} \int_d^\infty e^{\frac{-x^2}{4Dt}} dx + \int_{-d}^d e^{\frac{-(kx+ae^{-kt})^2}{2Dk}} dx \right] \right\}^{-1} \quad (2.53)$$

Las dos integrales en  $N_2$  tienen soluciones que involucran funciones de error (ecuaciones 2.54 y 2.55), por lo tanto su exactitud es tan grande como pueda ser el número de sumandos de la función de error, cuya fórmula general es la ecuación 2.56. Para realizar el comparativo entre la solución 2.51 y la solución de Araujo y Drigo Filho [27], (ecuaciones 2.57, 2.58 y 2.59) se utilizaron los siguientes valores para las constantes del problema:  $d = 1,55$ ,  $D = 1$  y  $k = 1,4$ , se tomó hasta la décima sumatoria de la función de error  $n = 10$  y se graficó para  $t = 1$ . Se observó que la constante  $a$  corre la solución hacia la derecha e izquierda de  $x = 0$ , así que se utilizó aquel valor que sitúa el pico de la solución en  $x = 0$  (ver figura 2-2).

$$\int_d^\infty e^{\frac{-x^2}{4Dt}} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\frac{1}{Dt}}} \left\{ 1 - \text{Erf} \left[ \frac{1}{2} d \sqrt{\frac{1}{Dt}} \right] \right\}, \quad \frac{1}{Dt} > 0 \quad (2.54)$$

$$\int_{-d}^d e^{\frac{-(kx+ae^{-kt})^2}{2Dk}} dx = \frac{\sqrt{D} \sqrt{\frac{\pi}{2}}}{\sqrt{k}} \left\{ -\text{Erf} \left[ \frac{ae^{-kt}-dk}{\sqrt{2Dk}} \right] + \text{Erf} \left[ \frac{ae^{-kt}+dk}{\sqrt{2Dk}} \right] \right\} \quad (2.55)$$

$$\text{Erf}(y) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n y^{2n+1}}{n!(2n+1)} \quad (2.56)$$

Solución de Araujo y Drigo Filho [27]:

$$P(x, t) = \begin{cases} \frac{N_I}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{\frac{-x^2}{4Dt}}, & x < -d \\ N_I g(t) \sum_{m=0}^j \left( \frac{1}{2^m m!} \sqrt{\frac{k}{2\pi D}} \right) e^{\frac{kx^2}{2D}} H_m \left( \sqrt{\frac{k}{2D}} x \right) H_m(0) e^{-t|mk|}, & -d \leq x \leq d \\ \frac{N_I}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{\frac{-x^2}{4Dt}}, & x > d \end{cases} \quad (2.57)$$

$$g(t) = \frac{e^{\frac{-d^2}{4Dt}}}{\sqrt{4\pi Dt}} \left\{ \sum_{m=0}^j \left( \frac{1}{2^m m!} \sqrt{\frac{k}{2\pi D}} \right) e^{\frac{-kd^2}{2D}} H_m \left( \sqrt{\frac{k}{2D}} d \right) H_m(0) e^{-t|mk|} \right\}^{-1} \quad (2.58)$$

$$N_I = \left\{ \frac{2}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_d^\infty e^{\frac{-x^2}{4Dt}} dx + g(t) \int_{-d}^d \sum_{m=0}^j \left( \frac{1}{2^m m!} \sqrt{\frac{k}{2\pi D}} \right) e^{\frac{-kd^2}{2D}} H_m \left( \sqrt{\frac{k}{2D}} d \right) H_m(0) e^{-t|mk|} dx \right\} \quad (2.59)$$

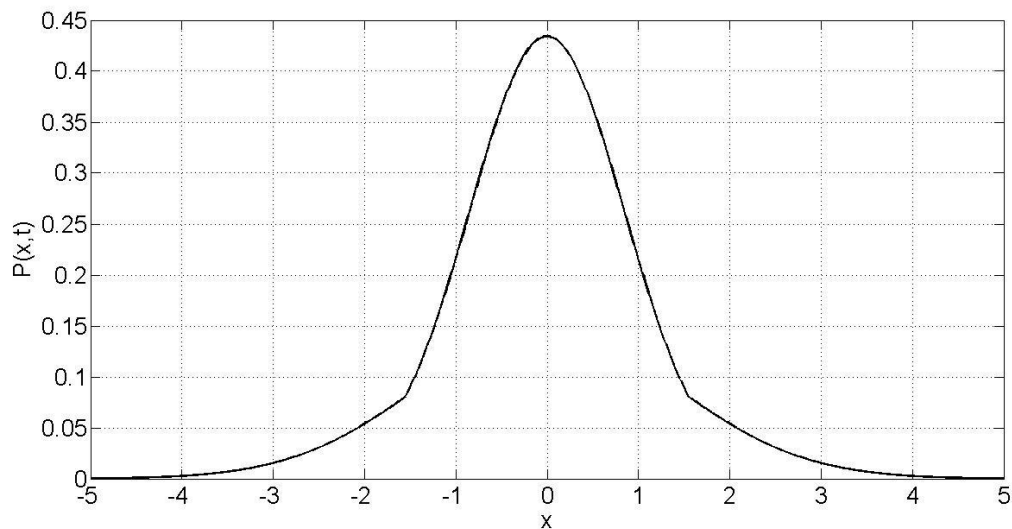
Donde los  $H_m(y)$  son los polinomios de Hermite de orden  $m$ . Este tipo de solución en series para la ecuación de Fokker-Planck es ya conocida [27], [28]. Consiste en hacer una analogía entre la ecuación de Fokker-Planck y la ecuación de Schrödinger, lo que lleva a buscar soluciones de tipo:

$$P(x, t) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m \phi_0(x) \phi_n(x) e^{-t|\lambda_n|}$$

En la figura 2-2 se muestra la gráfica de la densidad de probabilidad para  $m = 0$ ; En ambos casos, tanto para la solución por grupos de Lie como para la solución de Araujo y Drigo Filho [27] se usó  $n = 10$  para las funciones de error. La posición de una curva sobre la otra muestra la validez del método de grupos de Lie para solucionar ecuaciones de Fokker-Planck, siendo inclusive más preciso este método como lo muestra la figura 2-3. Es necesario aclarar que el error en ambas soluciones se encontró reemplazando la solución en la ecuación diferencial para el oscilador, ecuación 2.44, como aparece en la ecuación 2.60.

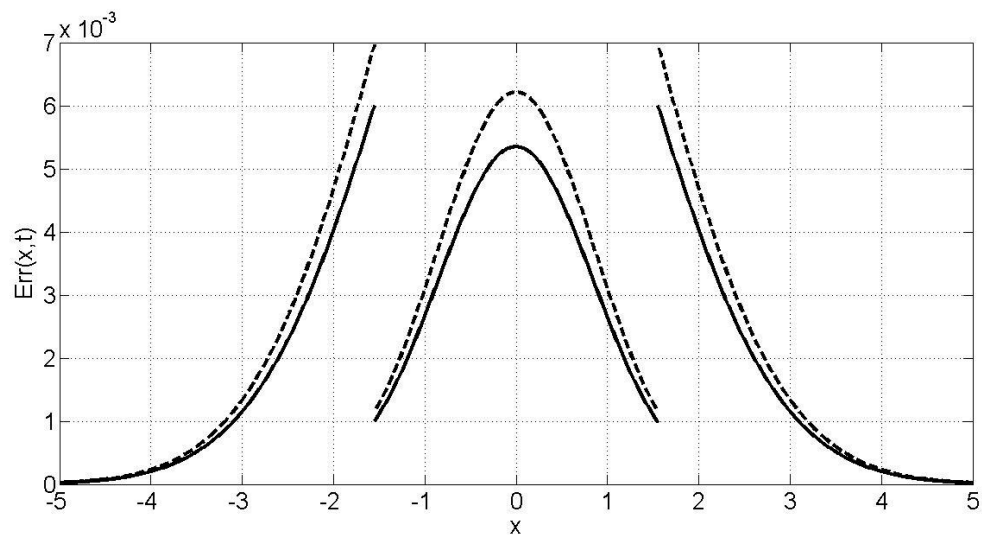
$$Err = \begin{cases} DP_{xx} - P_t, & -d > x, x > d \\ DP_{xx} + kxP_x + kP - P_t, & -d \leq x \leq d \end{cases} \quad (2.60)$$

**Figura 2-2:** Densidad de probabilidad para el oscilador armónico truncado



*Ambas soluciones se encuentran en la misma curva.*



**Figura 2-3:** Error en la solución del oscilador armónico truncado

La línea continua corresponde al método de grupos de Lie. La línea discontinua corresponde a la solución de Araujo y Drigo Filho [27]. La discontinuidad de las curvas en  $d = 1,55$  se debe a que en este punto se encuentra el cambio de potencial del oscilador.



## 3 Planteamiento y solución de la ecuación de onda de choque

### 3.1 Planteamiento del modelo

Para la elaboración del modelo de la onda de choque se emplearon elementos del modelo del movimiento Browniano y del modelo de flujo de tráfico; se considera un grupo de partículas que se mueven a una velocidad  $v_m$  (velocidad máxima) y colisionan con partículas de un gas que se encuentra a velocidad media cero. Se hacen las siguientes consideraciones:

1. Las partículas del gas a velocidad  $v_m$  son considerablemente más grandes que las del gas con el que colisionan.
2. Las fuerzas viscosas experimentadas por las partículas son considerablemente más grandes que las fuerzas convectivas.
3. Las partículas son esféricas.
4. Las fuerzas aleatorias se comportan como ruido blanco.

Estas consideraciones fueron tomadas de los modelos del movimiento Browniano empleados por A. Einstein y P. Langevin, según se encuentran descritas en [14, pp. 2-15] De la primera consideración se deriva que la disminución en la velocidad de las partículas más grandes debido a las colisiones con las pequeñas se puede interpretar como provocada por una fuerza de arrastre, similar a la que experimenta un objeto macroscópico en un medio fluido, mientras la segunda consideración hace posible desprestigiar las fuerzas convectivas y considerar que el arrastre se debe solamente a las fuerzas viscosas.

Lo anterior se fundamenta en que siendo el número de Reynolds  $R_e$  la relación entre las fuerzas convectivas y las fuerzas viscosas, un  $R_e < 1$  indicaría el predominio de las fuerzas viscosas; como se muestra en la siguiente ecuación.

$$R_e = \frac{vD_0}{\varpi}$$

Donde  $v$  es la velocidad,  $D_0$  es el diámetro del objeto esférico o el diámetro equivalente del objeto y  $\varpi$  es la viscosidad cinemática del medio. Entonces para una molécula de gas con diámetro del orden de  $10^{-10}m$ , una viscosidad del orden de  $10^{-5} m^2/s$  y velocidad del sonido del orden de  $10^2 m/s$ , valores típicos para el aire en condiciones atmosféricas estándar, el número de Reynolds es  $R_e < 1$ . En los casos con fuerzas viscosas predominantes, la fuerza de arrastre está dada por la ley de Stokes para objetos esféricos:

$$F_d = 6\pi\mu R_0 v$$

Donde  $\mu$  es la viscosidad dinámica y  $R_0$  es el radio de la partícula esférica. Ahora, de la expresión para la viscosidad dinámica  $\mu = \varpi\rho$  y considerando el estado de equilibrio de una molécula que viaja entre el fluido, la fuerza de arrastre será constante y la velocidad se podrá expresar como:

$$v = \frac{c}{\rho}$$

Donde  $c$  es una constante. Basado en esta relación entre la velocidad y la densidad del fluido es posible construir un modelo para la velocidad de las moléculas en la dirección en la que son lanzadas, como se muestra en seguida:

$$v = v_m \left(1 - \frac{\rho}{\rho_m}\right) \quad (3.1)$$

Aquí,  $\rho_m$  y  $v_m$  son la densidad máxima del fluido y la velocidad máxima de las moléculas, que para una onda de choque es mayor a la velocidad del sonido en el medio, y  $\rho$  y  $v$  son la densidad y velocidad actuales. De esta forma, si la densidad actual es máxima, entonces la velocidad es mínima, lo cual quiere decir que la molécula se encuentra en la zona más densa de la onda de choque. En caso contrario, si la densidad actual es mínima, entonces la velocidad es máxima y la molécula se encuentra en una zona de baja densidad o en el flujo libre antes de entrar en contacto con el gas. Esta ecuación pertenece al modelo de flujo de tráfico que describe la evolución de la densidad de automóviles en una calle [29].

### 3.1.1 Análisis dinámico

Se realiza una sumatoria de fuerzas en dirección del movimiento para las partículas grandes, considerando que una molécula dentro del fluido experimenta dos fuerzas; una fuerza aleatoria producida por el choque con otras moléculas de su misma clase y una fuerza viscosa producida por el arrastre de las moléculas estacionarias más pequeñas. Esto se describe mediante la ecuación de Langevin:

$$-\gamma \frac{dx}{dt} + \sigma(\zeta) = m \frac{d^2x}{dt^2} \quad (3.2)$$

Donde

$$\gamma = 6\pi\nu R_0$$

es el coeficiente de arrastre y  $\sigma(\zeta)$  es la fuerza aleatoria. En cuanto a la fuerza aleatoria, la cuarta consideración lleva a que el promedio de la fuerza es nulo [14, p. 13] y que dos de estas variables están correlacionadas sólo si el proceso se encuentra en desequilibrio, con lo cual, la correlación queda como:

$$\langle \sigma(\zeta)\sigma(\xi) \rangle = \Gamma\delta(t_1 - t_2)$$

Sólo si  $t_2$  que es el tiempo empleado para llegar al equilibrio, es igual a  $t_1$ , la correlación es diferente de cero [14, p. 43].

### 3.1.2 Construcción de la ecuación de Fokker-Planck para la onda de choque

La ecuación de Fokker-Planck del modelo planteado, para una densidad de partículas dependiente de la posición, la velocidad y el tiempo es:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, v, t) \approx -\frac{\partial}{\partial x} [a_1(x)\rho] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [a_2(x)\rho] - \frac{\partial}{\partial v} [a_1(v)\rho] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} [a_2(v)\rho] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x \partial v} [a_2(xv)\rho] \quad (3.3)$$

Donde  $x, v$  y  $t$  son las variables independientes posición, velocidad y tiempo,  $\rho$  es la densidad, y  $a_1(x)$ ,  $a_2(x)$ ,  $a_1(v)$ ,  $a_2(v)$  y  $a_2(xv)$  son los primeros y segundos momentos de las distribuciones de probabilidad, obtenidos para el límite  $\lim_{\Delta t \rightarrow 0}$  :

$$\begin{aligned}
a_1(x) &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} a_1(x, \Delta t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \langle \Delta x \rangle \\
a_2(x) &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} a_2(x, \Delta t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \langle \Delta x^2 \rangle \\
a_1(v) &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} a_1(v, \Delta t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \langle \Delta v \rangle \\
a_2(v) &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} a_2(v, \Delta t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \langle \Delta v^2 \rangle \\
a_2(xv) &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} a_1(xv, \Delta t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \langle \Delta x \Delta v \rangle
\end{aligned}$$

Estas distribuciones se pueden obtener a partir de la ecuación de Langevin [14, p. 131], como se muestra a continuación:

1. Para la variable  $x$

$$\begin{aligned}
a_1(x) &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \langle \Delta x \rangle = v \\
a_2(x) &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \langle xx \rangle = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \langle \Delta v \Delta v \Delta t \Delta t \rangle = 0
\end{aligned}$$

2. Para la variable  $v$

Partiendo de la ecuación de Langevin

$$\frac{dv}{dt} = -\frac{\gamma}{m}v + \sigma(\zeta)$$

E integrando para un período  $\{t, t + \Delta t\}$

$$\int_t^{t+\Delta t} \frac{dv}{dt} dt = -\frac{\gamma}{m}v \int_t^{t+\Delta t} dt + \int_t^{t+\Delta t} \sigma(\zeta) d\zeta$$

$$\langle \Delta v \rangle = -\frac{\gamma}{m}v \Delta t + \int_t^{t+\Delta t} \langle \sigma(\zeta) \rangle dt = -\frac{\gamma}{m}v \Delta t$$

$$a_1(v) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \langle \Delta v \rangle = -\frac{\gamma}{m}v$$

Donde se ha empleado la consideración de que el promedio de las fuerzas aleatorias es nulo. Ahora, encontrando el segundo momento de la distribución de velocidades:

$$\langle(\Delta v)^2\rangle = -\frac{\gamma^2}{m^2}v^2\Delta t\Delta t - \frac{\gamma}{m^2}v\Delta t \int_t^{t+\Delta t} \langle\sigma(\zeta)\rangle d\zeta + \int_t^{t+\Delta t} \langle\sigma(\zeta)\sigma(\xi)\rangle d\zeta d\xi$$

Reemplazando el valor de la correlación de las fuerzas aleatorias

$$\langle(\Delta v)^2\rangle = -\frac{\gamma^2}{m^2}v^2\Delta t\Delta t - \frac{\gamma}{m^2}v\Delta t \int_t^{t+\Delta t} \langle\sigma(\zeta)\rangle d\zeta + \int_t^{t+\Delta t} \Gamma\delta(t) dt dt$$

$$\langle(\Delta v)^2\rangle = -\frac{\gamma^2}{m^2}v^2\Delta t\Delta t + \Gamma\Delta t$$

Entonces el segundo momento de la distribución de velocidades es:

$$a_2(v) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \langle(\Delta v)^2\rangle = \Gamma$$

Si se trata de manera similar, se llega a que el segundo momento  $a_2(xv)$  es nulo. Sólo queda por definir el coeficiente de correlación  $\Gamma$ , que de acuerdo a la relación de fluctuación-disipación es:

$$\Gamma = 2\langle v^2 \rangle \frac{\gamma}{m}$$

El promedio del cuadrado de la velocidad se obtiene de la equipartición de la energía:

$$\langle v^2 \rangle = \frac{k_B T}{m}$$

Entonces el coeficiente de correlación queda como:

$$\Gamma = 2 \frac{\gamma k_B T}{m^2}$$

Así que reemplazando este coeficiente, al igual que los momentos de las distribuciones en la ecuación de Fokker-Planck, se obtiene la ecuación que describe el fenómeno de la onda de choque según el modelo planteado:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, v, t) \approx -\frac{\partial}{\partial x} [v\rho] + \frac{\partial}{\partial v} \left[ \frac{\gamma}{m} v\rho \right] + \frac{\partial^2}{\partial v^2} \left[ \frac{\gamma k_B T}{m^2} \rho \right]$$

Usando el modelo para la velocidad expresado previamente en la ecuación 3.1., se llega a la siguiente expresión de una ecuación diferencial parcial de segundo orden no lineal:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, v, t) \approx -\frac{\partial}{\partial x} \left[ v_m \left( 1 - \frac{\rho}{\rho_m} \right) \rho \right] + \frac{\partial}{\partial v} \left[ \frac{\gamma}{m} v_m \left( 1 - \frac{\rho}{\rho_m} \right) \rho \right] + \frac{\partial^2}{\partial v^2} \left[ \frac{\gamma k_B T}{m^2} \rho \right] \quad (3.4)$$

## 3.2 Aplicación del método de grupos de Lie a la solución de la ecuación de la onda de choque

A continuación se muestra el algoritmo indicado antes, aplicado a la ecuación 3.4:

- 1) Reacomodando términos y agrupando constantes, se puede llegar a la siguiente forma de la ecuación 3.4.

$$A\rho_{vv} + B\rho\rho_v + C\rho_v + H\rho\rho_x + E\rho_x - \rho_t = 0$$

Donde

$$A = \frac{\gamma k_B T}{m^2}, B = -\frac{2\gamma v_m}{m\rho_m}, C = \frac{\gamma v_m}{m}, H = \frac{2v_m}{\rho_m}, E = -v_m$$

- 2) Los coeficientes infinitesimales para cada variable se nombrarán de ahora en adelante de la siguiente manera:

Para la posición  $\xi(x, v, t, \rho)$

Para la velocidad  $\eta(x, v, t, \rho)$

Para el tiempo  $\tau(x, v, t, \rho)$

Para la densidad  $\varphi(x, v, t, \rho)$



3) La expresión para el generador infinitesimal es:

$$V = \xi(x, v, t, \rho) \frac{\partial}{\partial x} + \eta(x, v, t, \rho) \frac{\partial}{\partial v} + \tau(x, v, t, \rho) \frac{\partial}{\partial t} + \varphi(x, v, t, \rho) \frac{\partial}{\partial \rho}$$

4) Como la ecuación es de segundo orden, se obtiene entonces la segunda prolongación del generador infinitesimal:

$$\begin{aligned} Pr^2V = & \xi \frac{\partial}{\partial x} + \eta \frac{\partial}{\partial v} + \tau \frac{\partial}{\partial t} + \varphi \frac{\partial}{\partial \rho} + \varphi^x \frac{\partial}{\partial \rho_x} + \varphi^v \frac{\partial}{\partial \rho_v} + \varphi^t \frac{\partial}{\partial \rho_t} + \varphi^{xx} \frac{\partial}{\partial \rho_{xx}} \\ & + \varphi^{vv} \frac{\partial}{\partial \rho_{vv}} + \varphi^{tt} \frac{\partial}{\partial \rho_{tt}} + \varphi^{xv} \frac{\partial}{\partial \rho_{xv}} + \varphi^{xt} \frac{\partial}{\partial \rho_{xt}} + \varphi^{vt} \frac{\partial}{\partial \rho_{vt}} \end{aligned}$$

A continuación se aplica el criterio de simetría:

$$\begin{aligned} & \left( \xi \frac{\partial}{\partial x} + \eta \frac{\partial}{\partial v} + \tau \frac{\partial}{\partial t} + \varphi \frac{\partial}{\partial \rho} + \varphi^x \frac{\partial}{\partial \rho_x} + \varphi^v \frac{\partial}{\partial \rho_v} + \varphi^t \frac{\partial}{\partial \rho_t} + \varphi^{xx} \frac{\partial}{\partial \rho_{xx}} + \varphi^{vv} \frac{\partial}{\partial \rho_{vv}} \right. \\ & \quad \left. + \varphi^{tt} \frac{\partial}{\partial \rho_{tt}} + \varphi^{xv} \frac{\partial}{\partial \rho_{xv}} + \varphi^{xt} \frac{\partial}{\partial \rho_{xt}} + \varphi^{vt} \frac{\partial}{\partial \rho_{vt}} \right) (A\rho_{vv} + B\rho\rho_v + C\rho_v \\ & \quad + H\rho\rho_x + E\rho_x - \rho_t) = 0 \end{aligned}$$

Aplicando el operador sobre la ecuación se llega a una expresión en términos del coeficiente infinitesimal correspondiente a la densidad:

$$A\varphi^{vv} + (B\rho + C)\varphi^v + (H\rho + E)\varphi^x - \varphi^t + (B\rho_v + H\rho_x)\varphi = 0$$

5) Ahora se procede a encontrar los cuatro coeficientes  $\varphi^{\alpha,j}$  de la ecuación anterior; para esto es necesario construir la ecuación característica del generador infinitesimal  $Q^\alpha$

$$Q^\alpha(x, v, t, \rho^{(1)}) = \varphi - \xi \frac{\partial \rho}{\partial x} - \eta \frac{\partial \rho}{\partial v} - \tau \frac{\partial \rho}{\partial t}$$

$$\varphi^x = D_x \left( \varphi - \xi \frac{\partial \rho}{\partial x} - \eta \frac{\partial \rho}{\partial v} - \tau \frac{\partial \rho}{\partial t} \right) + \xi \rho_{xx} + \eta \rho_{xv} + \tau \rho_{xt}$$

$$\varphi^v = D_v \left( \varphi - \xi \frac{\partial \rho}{\partial x} - \eta \frac{\partial \rho}{\partial v} - \tau \frac{\partial \rho}{\partial t} \right) + \xi \rho_{vx} + \eta \rho_{vv} + \tau \rho_{vt}$$

$$\varphi^t = D_t \left( \varphi - \xi \frac{\partial \rho}{\partial x} - \eta \frac{\partial \rho}{\partial v} - \tau \frac{\partial \rho}{\partial t} \right) + \xi \rho_{tx} + \eta \rho_{tv} + \tau \rho_{tt}$$

$$\varphi^{vv} = D_{vv} \left( \varphi - \xi \frac{\partial \rho}{\partial x} - \eta \frac{\partial \rho}{\partial v} - \tau \frac{\partial \rho}{\partial t} \right) + \xi \rho_{v vx} + \eta \rho_{v vv} + \tau \rho_{v vt}$$

A continuación, se efectúan las derivadas totales  $D_J$  y se reemplazan los  $\varphi^{\alpha,J}$  en la ecuación resultado del criterio de simetría (ecuación del paso 4). Para completar el criterio de simetría se despeja una de las derivadas de  $\rho$  de la ecuación de onda de choque (paso 1) y se reemplaza también; en este caso se escogió  $\rho_{vv}$ . El resultado de todo esto es una ecuación polinómica que involucra varias derivadas de  $\rho$  cuyos coeficientes son ciertas derivadas de  $\xi$ ,  $\eta$ ,  $\tau$  y  $\varphi$ . Una solución general a esta ecuación se obtiene igualando los coeficientes a cero, ya que esto no representa ninguna restricción para  $\rho$ . De esta manera se obtiene un conjunto de ecuaciones simultáneas para los coeficientes infinitesimales.

**Tabla 3-1:** Sistema de ecuaciones acopladas para coeficientes infinitesimales. Onda de choque

Monomio	Coficiente
$\rho_t$	$-2\eta_v - A\tau_{vv} - C\tau_v - E\tau_x + \tau_t = 0$
$\rho_x$	$-A\xi_{vv} + 2E\eta_v - C\xi_v - E\xi_x + \xi_t + H\varphi = 0$
$\rho\rho_x$	$2H\eta_v - B\xi_v - H\xi_x = 0$
$\rho_v$	$E\eta_x + A\varphi_{\rho v} + C\eta_v - A\eta_{vv} + \eta_t + B\varphi = 0$
$\rho\rho_v$	$B\eta_v - H\eta_x = 0$
$\rho_v^2$	$A\varphi_{\rho\rho} + 2C\eta_\rho - 2A\eta_{\rho v} = 0$
1	$A\varphi_{vv} + C\varphi_v + E\varphi_x - \varphi_t = 0$
$\rho_{xv}\rho_v$	$2A\xi_\rho = 0$
$\rho_{xv}$	$2A\xi_v = 0$
$\rho_v\rho_x$	$-2A\xi_{\rho v} + 2E\eta_\rho = 0$
$\rho\rho_v\rho_x$	$2H\eta_\rho = 0$
$\rho_x\rho_v^2$	$A\xi_{\rho\rho} = 0$
$\rho_v\rho_t$	$2\eta_\rho + 2A\tau_{\rho v} = 0$
$\rho\rho_v^2$	$2B\eta_\rho = 0$

Monomio	Coefficiente
$\rho_v^3$	$A\eta_{\rho\rho} = 0$
$\rho_v\rho_{vt}$	$A\tau_{\rho} = 0$
$\rho_{vt}$	$A\tau_v = 0$
$\rho_v^2\rho_t$	$A\tau_{\rho\rho} = 0$
$\rho$	$B\varphi_v + H\varphi_x = 0$
$\rho\rho_t$	$B\tau_v + H\tau_x = 0$

**Tabla 3-1:** (Continuación)

6) La solución a este sistema es el grupo de coeficientes:

$$\tau(t) = a_1 t + a_2$$

$$\xi(x, t) = a_1 x - a_3 H t + a_4$$

$$\eta(x, v, t) = a_1 \frac{v}{2} + a_1 \frac{B}{2H} x - a_1 \frac{EB}{2H} t - a_1 \frac{C}{2} t - a_3 B t + a_5$$

$$\varphi = a_3$$

7) Según las ecuaciones del paso anterior, el álgebra de simetría que se obtiene al reemplazar los coeficientes infinitesimales en el generador infinitesimal es:

**Tabla 3-2:** Álgebra de simetría para la ecuación de onda de choque

Constante	Generador
$a_1$	$V_1 = x \frac{\partial}{\partial x} + t \frac{\partial}{\partial t} + \left( \frac{1}{2} v + \frac{B}{2H} x - \frac{EB}{2H} t - \frac{C}{2} t \right) \frac{\partial}{\partial v}$
$a_2$	$V_2 = \frac{\partial}{\partial t}$
$a_3$	$V_3 = \frac{\partial}{\partial \rho} - H t \frac{\partial}{\partial x} - B t \frac{\partial}{\partial v}$
$a_4$	$V_4 = \frac{\partial}{\partial x}$
$a_5$	$V_5 = \frac{\partial}{\partial v}$

8) A continuación se detalla el método para obtener la primera solución invariante a partir del álgebra de simetría: Se escoge el generador correspondiente a la constante  $a_2$ , es decir:

$$V_2 = \frac{\partial}{\partial t}$$

Para este generador, los coeficientes infinitesimales se anulan, excepto  $\tau(t)$  porque es el único que corresponde a la constante  $a_2$ .

$$\begin{aligned}\tau(t) &= a_2 \\ \xi(x, t) &= 0 \\ \eta(x, v, t) &= 0 \\ \varphi &= 0\end{aligned}$$

Reemplazando en la ecuación característica se obtiene que:

$$Q = -a_2 \frac{\partial \rho}{\partial t}$$

Usando la condición expresada en las ecuaciones 2.28, las soluciones invariantes se obtienen solucionando el sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned}A\rho_{vv} + B\rho\rho_v + C\rho_v + H\rho\rho_x + E\rho_x - \rho_t &= 0 \\ -a_2 \frac{\partial \rho}{\partial t} &= 0\end{aligned}$$

Parametrizando la segunda ecuación:

$$\frac{d\rho}{d\beta} = \frac{\partial \rho}{\partial t} \frac{dt}{d\beta}$$

se deduce que

$$a_2 = \frac{dt}{d\beta}$$

e integrando se llega a

$$\beta = \frac{1}{a_2} t$$

De manera que se puede hacer un cambio de variables; a  $\beta$  se le llamará  $y$  (variable independiente).

$$y = \frac{1}{a_2} t$$

Y a  $w = \rho$  se le tomará como variable dependiente. Organizado de esta manera, se puede asegurar que  $w$  se expresa en términos de  $t$ ,  $\rho = w(y)$ . Entonces se obtienen las derivadas  $\rho_{vv}$ ,  $\rho_v$ ,  $\rho_x$  y  $\rho_t$

$$\rho_t = w' \frac{1}{a_2}, \quad \rho_v = \rho_{vv} = \rho_x = 0$$

Reemplazando esto en la ecuación de la onda de choque se obtiene la siguiente expresión:

$$-w' \frac{1}{a_2} = 0$$

De manera que  $\rho = w = a_6$  donde  $a_6$  es una constante. Con los otros generadores se empleó el mismo procedimiento. Las soluciones y los generadores correspondientes se listan a continuación:

a) Primera solución invariante

Para el generador  $V_2 = \frac{\partial}{\partial t}$  la solución es  $\rho = \text{constante}$

b) Segunda solución invariante

Para el generador  $V_4 = \frac{\partial}{\partial x}$  la solución es  $\rho = \frac{-E}{H}$

c) Tercera solución invariante

Para el generador  $V_5 = \frac{\partial}{\partial v}$  la solución es

$$\rho = \frac{\sqrt{C^2 + 2c_1 AB}}{B} \tanh \left[ \frac{\sqrt{C^2 + 2c_1 AB}}{A} \left( c_2 + \frac{v}{2} \right) \right] - \frac{C}{B} \quad (3.5)$$

Donde  $c_1$  y  $c_2$  son constantes de integración que dependen de las condiciones del problema.

d) Cuarta solución invariante

Para el generador  $V_3 = \frac{\partial}{\partial \rho} - Ht \frac{\partial}{\partial x} - Bt \frac{\partial}{\partial v}$  la solución es trivial

e) Quinta solución invariante

Para el generador  $V_1 = x \frac{\partial}{\partial x} + t \frac{\partial}{\partial t} + \left( \frac{1}{2}v + \frac{B}{2H}x - \frac{EB}{2H}t - \frac{C}{2}t \right) \frac{\partial}{\partial v}$  la solución es

$$\rho = c_5 \exp \left\{ -\frac{1}{2A} \left[ t \left( C^2 - \frac{2CEB}{H} - \frac{3E^2B^2}{H^2} \right) + \frac{1}{t} \left( v - \frac{Bx}{H} \right)^2 \right] \right\} + c_4 \quad (3.6)$$

$c_4$  y  $c_5$  son las constantes de integración

f) Sexta solución invariante

Para la combinación lineal de los generadores  $V_2 = \frac{\partial}{\partial t}$  y  $V_4 = \frac{\partial}{\partial x}$  la solución es

$$\rho = -\frac{(Ea + 1)}{Ha}$$

donde  $a$  es el cociente entre las constantes de los generadores dos y cuatro  $a = \frac{a_2}{a_4}$

g) Séptima solución invariante

Para los generadores  $V_2 = \frac{\partial}{\partial t}$  y  $V_3 = \frac{\partial}{\partial \rho} - Ht \frac{\partial}{\partial x} - Bt \frac{\partial}{\partial v}$  la solución es

$$\begin{aligned} \rho = & \frac{a_3}{a_2} \left[ \Gamma_3 \Gamma_4 [(2\Gamma_1^2)/(\Gamma_3 \Gamma_4)]^{2/3} \text{airy}(3, -\phi) - 2c_4 \Gamma_1 \Gamma_2 \text{airy}(0, -\phi) - \right. \\ & 2\Gamma_1 \Gamma_2 \text{airy}(2, -\phi) + c_4 \Gamma_3 \Gamma_4 [(2\Gamma_1^2)/(\Gamma_3 \Gamma_4)]^{2/3} \text{airy}(1, -\phi) + \sqrt{3} \Gamma_3 \Gamma_4 [(2\Gamma_1^2)/ \\ & \left. (\Gamma_3 \Gamma_4)]^{2/3} \text{airy}(3, -\phi) + \sqrt{3} c_4 \Gamma_3 \Gamma_4 [(2\Gamma_1^2)/(\Gamma_3 \Gamma_4)]^{2/3} \text{airy}(1, -\phi) \right] / \\ & \left[ 2\Gamma_1 \Gamma_3 \text{airy}(2, -\phi) + 2c_4 \Gamma_1 \Gamma_3 \text{airy}(0, -\phi) \right] + \frac{a_3}{a_2} t \quad (3.7) \end{aligned}$$

Donde

$$\begin{aligned} \phi = & \left\{ \Gamma_2^2 [(2\Gamma_1^2)/(\Gamma_3\Gamma_4)]^{2/3} + 2c_2\Gamma_3 [(2\Gamma_1^2)/(\Gamma_3\Gamma_4)]^{2/3} \right. \\ & + \sqrt{3}\Gamma_2^2 [(2\Gamma_1^2)/(\Gamma_3\Gamma_4)]^{2/3}i + 2\sqrt{3}c_2\Gamma_3 [(2\Gamma_1^2)/(\Gamma_3\Gamma_4)]^{2/3}i \\ & \left. - 2\Gamma_3\Gamma_4\gamma [(2\Gamma_1^2)/(\Gamma_3\Gamma_4)]^{2/3} - 2\sqrt{3}\Gamma_3\Gamma_4\gamma [(2\Gamma_1^2)/(\Gamma_3\Gamma_4)]^{2/3}i \right\} \\ & / (8\Gamma_1^2) \end{aligned}$$

$$\Gamma_1 = 2A \frac{a_2}{a_3} x^2 \left( \frac{Ht^2}{2x} + \frac{a_2}{a_3} \right)^2$$

$$\begin{aligned} \Gamma_2 = & BHxt^3 + 2B \frac{a_2}{a_3} x^2 t + C \frac{a_2}{a_3} Hxt^2 + 2Cx^2 \left( \frac{a_2}{a_3} \right)^2 - H^2vt^3 - Hc_1t^3 \\ & - E \frac{a_2}{a_3} Hvxt^2 - E \frac{a_2}{a_3} c_1t^2 - 2 \frac{a_2}{a_3} Hvxt - 2 \frac{a_2}{a_3} c_1xt \end{aligned}$$

$$\Gamma_3 = \left( BHxt^2 + 2Bx^2 \frac{a_2}{a_3} - H^2vxt^2 - Hc_1t^2 \right)$$

$$\Gamma_4 = -2 \frac{a_2}{a_3} x^2$$

$$y = \left( \frac{Hv + c_1}{2x} \right) t^2 + \frac{a_2}{a_3} v$$

$$c_1 = Bx - Hv$$

Los valores  $c_2$  y  $c_4$  son constantes de integración y los valores  $a_2$  y  $a_3$  son las constantes correspondientes a los generadores escogidos.

h) Octava solución invariante

Para los generadores  $V_4 = \frac{\partial}{\partial x}$  y  $V_5 = \frac{\partial}{\partial v}$  la solución es

$$\begin{aligned} \rho = & \frac{\sqrt{(aE-C)^2 + 2c_2(aH-B)}}{aH-B} \tanh \left\{ \sqrt{(aE-C)^2 + 2c_2(aH-B)} \left( c_3 + \frac{ax-v}{2A} \right) \right\} - \\ & \frac{(aE-C)}{(aH-B)} \quad (3.8) \end{aligned}$$

Donde  $c_2$  y  $c_3$  son constantes de integración y  $a$  es la relación entre las constantes de los generadores de simetría cuatro y cinco  $a = \frac{a_5}{a_4}$

Es necesario aclarar que aunque se espera que las soluciones a la ecuación de onda de choque posean dos constantes de integración debido a que se trata de una ecuación de segundo orden, algunas de las soluciones poseen además una tercer constante que proviene del método de grupos de Lie, como en el caso de la constante de Lie  $\alpha$  en la solución 3.8. Aunque existe la forma de simplificar el álgebra de Lie de tal manera que las soluciones contengan el menor número posible de constantes de Lie, la eficacia de la simplificación depende del grado de simetría del problema y a menudo se observan casos en los que algunas de las constantes de Lie persisten dentro de la solución, como es el caso de la *ecuación de calor* en [23, pp. 208-210] y [23, p. 212].



## 4 Resultados

### 4.1 Presentación y análisis de resultados

Dos soluciones en particular tienen una importancia sobresaliente. La ecuación 3.6 porque se reduce a la distribución de probabilidad de Maxwell-Boltzmann para estado estacionario y la ecuación 3.8., debido a que se encuentran datos experimentales disponibles para su comparación:

En la construcción de la ecuación de Fokker-Planck se considera que el tiempo  $\tau$  necesario para que el sistema pase de un subestado a otro es lo suficientemente grande como para que el sistema alcance el equilibrio en el nuevo subestado, pero lo suficientemente pequeño para que el proceso se pueda considerar reversible. Este tiempo es llamado tiempo de relajación y fue expresado por Albert Einstein en su estudio sobre el movimiento Browniano como aparece en la ecuación 4.1. Si se reemplaza este valor en la solución 3.6, se convierte en la solución para estado estacionario o de equilibrio, ecuación 4.2, tomando la forma de la distribución de Maxwell-Boltzmann. Esta característica se deriva de haber usado la relación de fluctuación-disipación para la expresión de la función de auto correlación cuando se obtuvieron los momentos de las distribuciones de probabilidad al construir la ecuación de la onda de choque.

$$\tau = \frac{m}{\gamma} \quad (4.1)$$

$$\rho = c_5 \exp \left[ -\frac{m}{2k_B T} \left( v - \frac{Bx}{H} \right)^2 \right] + c_4 \quad (4.2)$$

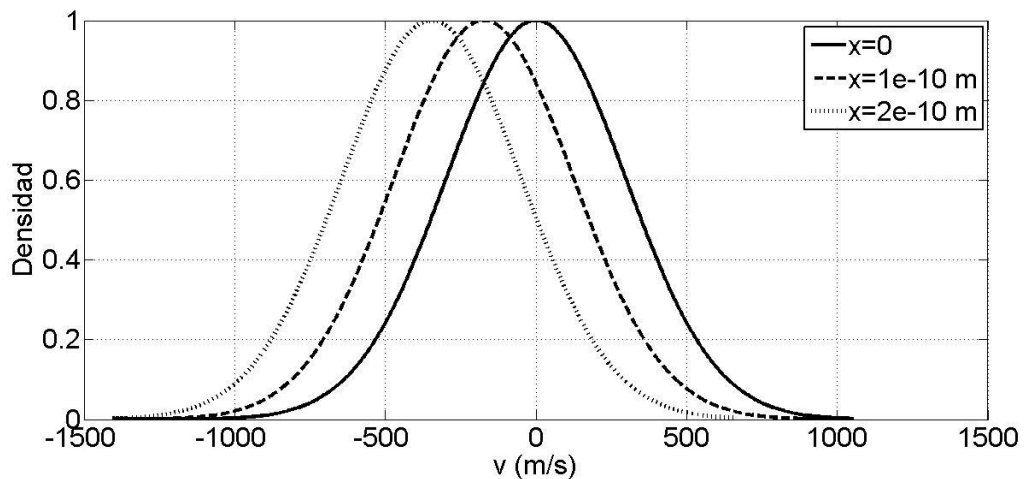
En la ecuación 3.6 se consideran las siguientes condiciones de frontera:  $\rho = 0$  para  $x \rightarrow \infty$  y  $\rho = 1$  para  $x = 0$ , donde se ha asumido que la onda de choque se encuentra en  $x = 0$  y por lo tanto la menor velocidad está en esa posición. En la figura 4-1 se muestra la

distribución de probabilidad para las velocidades en una onda de choque de Nitrógeno gaseoso a una temperatura del flujo libre de 288,15 K, tomando los siguientes valores:  $R_0 = 225 \times 10^{-12} \text{ m}$  (radio de la molécula o radio de Van der Waals),  $\mu = 17,1 \times 10^{-6} \text{ Pa.s}$  (viscosidad dinámica),  $m = 46,5 \times 10^{-27} \text{ kg}$  (masa de la molécula),  $\varrho = 1,4$  (relación de calores específicos). Se observa el corrimiento de la distribución gaussiana a medida que cambian las posiciones a partir del punto cero, indicando la velocidad con la mayor probabilidad de existencia para cada posición. En la figura 4-2 se muestra la evolución temporal de la probabilidad desde  $t = 0$  hasta  $t = \tau$ , es decir; el proceso que sigue la probabilidad hasta encontrar el primer subestado de equilibrio. La razón por la cual las curvas terminan en diferentes valores de la probabilidad es; que se obtuvieron para la posición  $x = 0$  donde se encuentra la densidad máxima y donde la velocidad es más probable tanto más cercana a  $v = 0$ , una característica de la ecuación de flujo de tráfico, ecuación 3.1. También se observa que el paso del tiempo hace que las probabilidades se acerquen entre sí, con una tendencia que indica que para  $t \rightarrow \alpha$  todas las velocidades son igualmente probables. Lo anterior sugiere que la ecuación 3.6 con las condiciones de frontera impuestas, da información sobre el proceso de disipación de la onda de choque; Se aclara que si bien la ecuación de Fokker-Planck no permite tener certeza de lo que le ocurre a un sistema por debajo del tiempo  $\tau$ , la tendencia de la curva en la figura 4-2 se mantiene para tiempos mayores de manera que esta conclusión es razonable y que la razón por la que sólo se grafica hasta  $t = \tau$  es tener un referente de este valor para compararlo luego con los valores de los tiempos de formación de las ondas de choque para Nitrógeno y Argón más adelante.

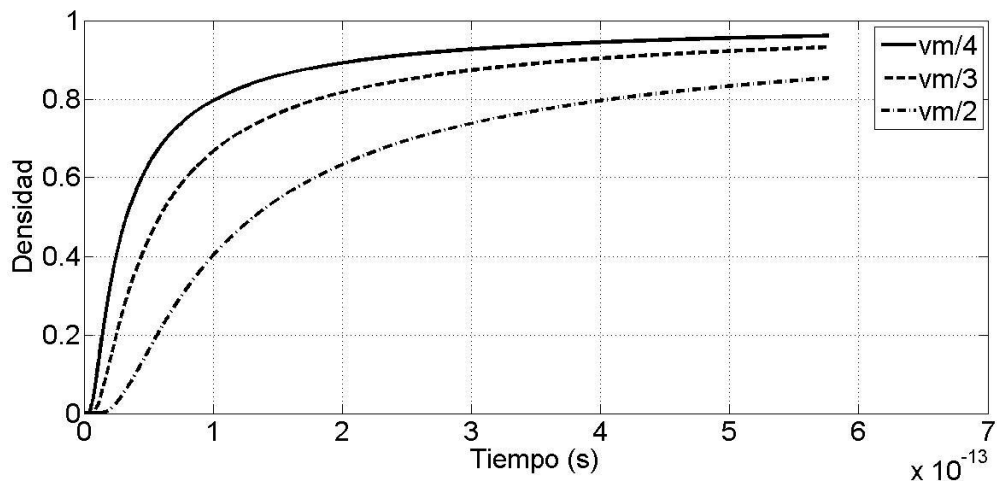
En el caso de la ecuación 3.8, fue posible obtener de ella información sobre el espesor de la onda de choque y comparar con los experimentos de Linzer y Horning [30] y [31]. El procedimiento fue el siguiente: en primer lugar se plantearon las condiciones de frontera,  $\rho = 0$  cuando  $x \rightarrow -\infty$  y  $\rho = 1/2$  cuando  $x = 0$  estas condiciones permiten que los valores de densidad se encuentren en la parte positiva del plano. Es necesario resaltar que esta solución posee dos constantes de integración  $c_2$  y  $c_3$  y una constante  $a$  que proviene del uso del método de grupos de Lie. Aunque es cierto que sin importar el valor de esta última constante las ecuaciones obtenidas siguen siendo soluciones de la ecuación de onda, es necesario obtener aquel valor que específicamente expresa la solución para un determinado gas con unas condiciones particulares. Las dos primeras constantes se obtuvieron a partir de las condiciones de frontera y la tercera por medio de iteraciones,

tomando como base los datos proporcionados por Linzer y Horning [30]; se observó que esta constante corre la función pero no cambia su forma hasta coincidir con los datos experimentales. La posición de la constante  $a$  en la ecuación indica que sus unidades son  $t^{-1}$ , lo que se ha interpretado como el inverso del tiempo que le toma al gas formar la onda de choque.

**Figura 4-1:** Densidad de probabilidad para la distribución de velocidades en una onda de choque en Nitrógeno gaseoso

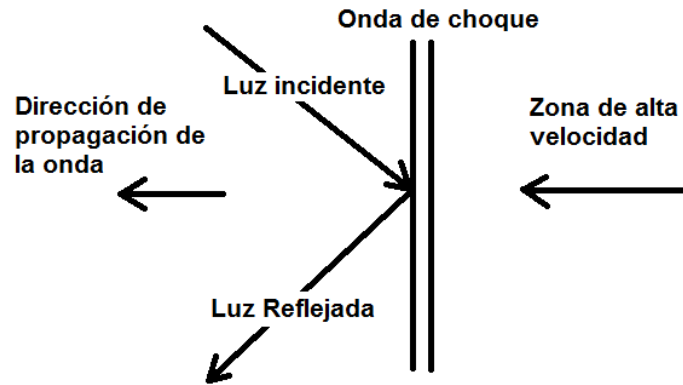


**Figura 4-2:** Proceso de relajación o tendencia al equilibrio en Nitrógeno gaseoso para diferentes velocidades de flujo



( $v_m$  es velocidad máxima). Se ha evaluado el proceso en  $x = 0$ , donde la velocidad con mayor probabilidad es  $v = 0$

Linzer y Horning [31] realizan un trabajo experimental en el que miden el espesor de ondas de choque a diferentes números Mach para Nitrógeno y Argón gaseosos por el método de reflexión de la luz; el experimento consistió en generar ondas de choque en estos dos gases por separado, controlando la velocidad inicial de las partículas, así como la presión del flujo libre (flujo delante de la onda de choque, en la dirección de propagación) y medir la reflectividad de luz de 435nm y 579nm sobre la superficie de la onda, como se muestra en la imagen al lado.



*Imagen explicativa del experimento de Linzer y Horning [30] y [31] (elaboración propia).*

Según [31] la expresión matemática de la reflectividad es

$$R_L = \left[ \frac{(\Delta n)^2 (1 + \tan^4 \theta)}{4n_1^2} \right] R'_L \left( \frac{l}{\cos \theta} \right)$$

Donde  $\theta$  es el ángulo de incidencia de la luz respecto a la normal al plano de la onda de choque,  $l$  es la longitud de onda de la luz, el término  $R'_L$  es llamado “reflectividad reducida” y  $\Delta n$  es el cambio del índice de refracción de la luz a través del frente de onda. Linzer y Horning [31] expresan que el cambio del índice de refracción está relacionado con la densidad de la siguiente manera:

$$\Delta n = (n - 1) \left( \frac{\rho_1}{\rho_0} \right) \left( \frac{\Delta \rho}{\rho_1} \right)$$

Donde el subíndice “0” indica valores correspondientes a condiciones estándar de presión y temperatura (NTP por sus siglas en Inglés) y que el perfil de densidad usado en su trabajo es de la forma:

$$\rho(x) = \rho_1 + \frac{\Delta \rho}{1 + \exp(-4x/L)}$$

Donde  $x$  se refiere a la posición paralela a la dirección de propagación y  $L$  es el espesor de la onda de choque para la máxima pendiente en este perfil de densidades; de forma gráfica: “el espesor para la máxima pendiente es obtenido dibujando una línea recta a través del punto de pendiente máxima del perfil y midiendo la distancia entre las intersecciones de esta línea con las extrapolaciones de las regiones delante y detrás” (traducción del inglés) [32]. Para el caso de la ecuación 3.8 se puede observar este método en la figura 4-3. En cuanto a la reflectividad reducida, encuentran que está relacionada con  $L$  como se muestra a continuación:

$$R'_L = \left[ \frac{\pi^2 L \cos \theta / l}{\sinh(\pi^2 L \cos \theta / l)} \right]^2$$

Y a su vez, el espesor de la onda de choque  $L$  está relacionado con el espesor de la onda de choque para condiciones de atmósfera estándar en el flujo libre.

$$L = L_0 \left( \frac{\hat{P}_0}{\hat{P}_1} \right)$$

Donde  $\hat{P}_1$  es la presión inicial o del flujo libre en condiciones distintas a la atmósfera estándar. Linzer y Horning encuentran  $L$  realizando experimentos a diferentes presiones  $\hat{P}_1$  y usando la relación anterior para encontrar el valor de  $L_0$  que es el que finalmente grafican en función del número Mach. “Al variar la presión inicial  $\hat{P}_1$  y usando la relación  $L = L_0 \left( \frac{\hat{P}_0}{\hat{P}_1} \right)$  donde  $L_0$  es el espesor a una atmósfera uno puede obtener una curva experimental para  $R'_L$  como función de  $(l \hat{P}_1) / (\cos \theta)$ . Para valores pequeños de  $R'_L$  esta curva es muy pronunciada y permite determinar  $L_0$  con una precisión considerable” [31, p. 4]. En las figuras 4-4 y 4-5 se muestran los resultados obtenidos por Linzer y Horning (puntos) y los resultados del presente proyecto (curva) a manera de comparación. Un hecho notable es que los espesores de las ondas de choque son considerablemente menores que las longitudes de onda usadas en los experimentos. La capacidad del método experimental para medir estos espesores se la atribuyen a lo siguiente: “Para hacer mediciones de reflectividad óptica en ondas de choque más fuertes que hasta ahora, fue necesario reforzar el aparato y emplear presiones de accionamiento mucho más altas que en trabajos anteriores, ya que la exigencia de que el espesor sea sustancialmente menor que la longitud de onda de la luz empleada impedía la disminución de la presión inicial. En

muchos casos se empleó conducción de combustión (combustión driving). Así pudimos generar ondas de choque tan fuertes como  $M = 4,7$  con presiones iniciales de aproximadamente una atmósfera. Además, una mayor apertura y una menor incertidumbre del sistema óptico aumentaron significativamente la relación señal-ruido, haciendo posible extender las mediciones a reflectividades inferiores. De esta manera, pudimos hacer mediciones hasta Mach 4,70 con mayor precisión que la alcanzada anteriormente” (traducción del inglés) [31].

Debido a que los resultados en [30] y [31] para  $L_0$  se encuentran en función de la trayectoria libre media de Maxwell en el flujo libre  $L'$ , de la forma  $L'/L_0$ , fue necesario despejar  $L_0$  para realizar la comparación en las figuras 4-4 y 4-5. La ecuación empleada para la trayectoria libre media fue:

$$L' = \frac{\mu}{\hat{P}_0} \sqrt{\frac{\pi k T_0}{2m}}$$

Donde  $\mu$  es la viscosidad dinámica,  $k$  es la constante de Boltzmann,  $m$  es la masa del átomo de argón o molécula de nitrógeno y  $T_0$  es la temperatura de la atmósfera estándar. Los valores NTP utilizados fueron los de la “International Standard Atmosphere” (ISA) para la altitud de Princeton donde se realizaron los experimentos  $\hat{P}_0 = 101325 \text{ pa}$  y  $T_0 = 288,15 \text{ K}$ . Los resultados experimentales se extrajeron de las tablas 2a, 2b y tabla 3 en [31] y los datos utilizados para graficar la curva de la ecuación 3.8 fueron para el nitrógeno:  $R_0 = 225 \times 10^{-12} \text{ m}$  (radio de la molécula o radio de Van der Waals),  $\mu = 17,1 \times 10^{-6} \text{ Pa.s}$  (viscosidad dinámica),  $m = 46,5 \times 10^{-27} \text{ kg}$  (masa de la molécula),  $\rho = 1,4$  (relación de calores específicos) y para el Argón:  $R_0 = 188 \times 10^{-12} \text{ m}$ ,  $\mu = 22,9 \times 10^{-6} \text{ Pa.s}$ ,  $m = 6,63 \times 10^{-26} \text{ kg}$  y  $\rho = 1,6$ .

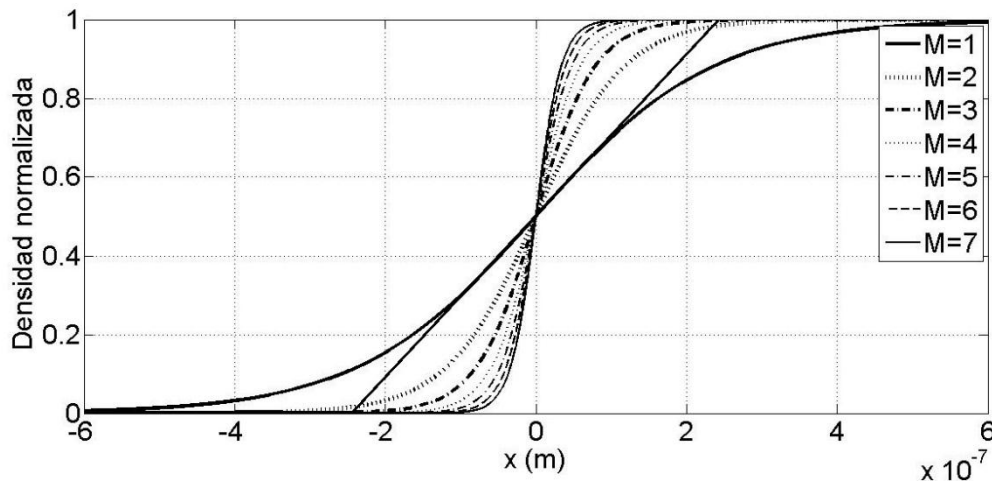
Se encontró gracias a la gráfica 4-3 que el espesor para la máxima pendiente del perfil de densidades corresponde a la ubicación del 80% de las partículas de la onda de choque, de tal manera que en las gráficas 4-4 y 4-5 la curva corresponde a este valor.

La figura 4-3 muestra la densidad de partículas en función de la posición para diferentes números Mach. Se nota en esta figura que el espesor disminuye para números Mach grandes y que su comportamiento no es lineal. En las figuras 4-4 y 4-5 se observa que las

ondas de choque en efecto son menores a la longitud de onda de la luz usada en [31]. El valor encontrado para el tiempo de formación de la onda fue de orden de  $4,7 \times 10^{-10}$  s para el Nitrógeno y de  $6,8 \times 10^{-9}$  s para el Argón; comparando esto con la magnitud del tiempo  $\tau$  se puede asegurar que la onda de choque descrita de manera estocástica se forma después de múltiples subestados de equilibrio siendo consistente con el proceso de Markov y con las condiciones de obtención de la ecuación de Fokker-Planck, lo que brinda seguridad sobre la veracidad de la información contenida en esta solución.

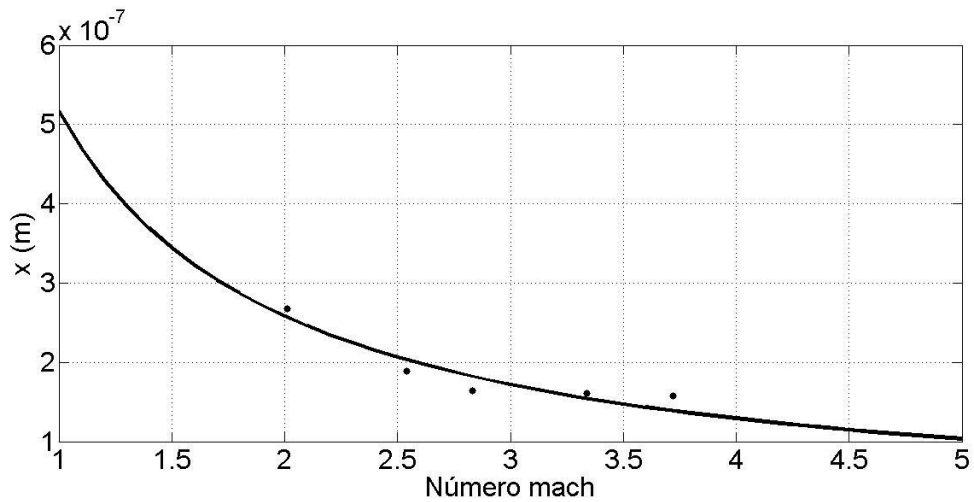
El mayor número de datos experimentales disponibles para el gas Argón, permite visualizar la limitante que tiene el modelo teórico, puesto que los datos parecen converger a un espesor ligeramente mayor a 200 nm para grandes números Mach, mientras que el modelo teórico lo hace a cero. Aún así el modelo parece comportarse bien en el rango entre  $M = 1$  y  $M = 2,5$ .

**Figura 4-3:** Densidad en función de la posición para ondas de choque en Nitrógeno gaseoso a diferentes números Mach



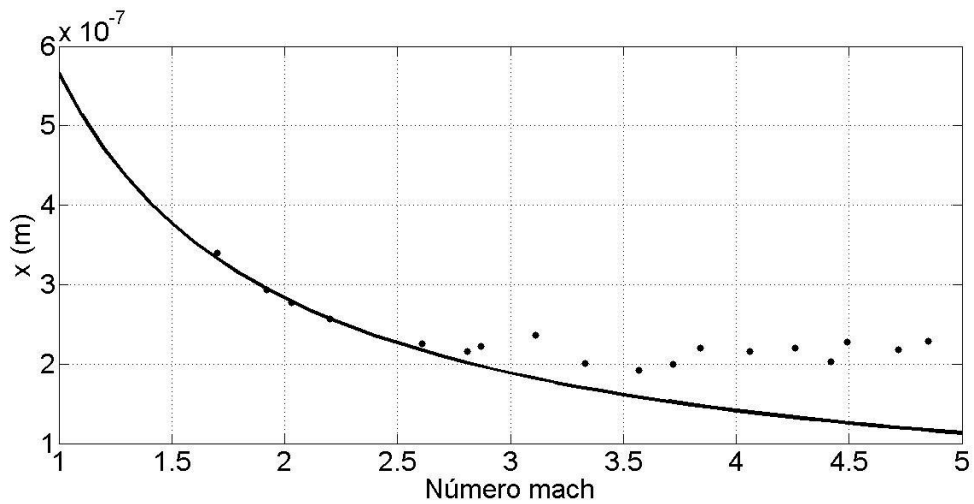
La línea recta es la prolongación de la mayor pendiente para el perfil de densidad a  $M = 1$ . El espesor de la onda de choque es la distancia entre las intersecciones de esta línea con las asíntotas.

**Figura 4-4:** Espesor de la onda de choque al 80% de la densidad para Nitrógeno gaseoso



Los puntos corresponden a los resultados experimentales de Linzer y Horning [31].

**Figura 4-5:** Espesor de la onda de choque al 80% de la densidad para gas Argón



Los puntos corresponden a los resultados experimentales de Linzer y Horning [31].



## 5 Conclusiones y recomendaciones

### 5.1 Oscilador armónico truncado

El problema del oscilador armónico truncado fue abordado en dos partes según el tipo de potencial; la primera parte del problema correspondió a un potencial constante, lo que dio lugar a simplificar la ecuación de Fokker-Planck a la forma de una ecuación de difusión de partículas no interactuantes. La segunda parte del problema correspondió a un potencial de Hooke. Ambos casos se solucionaron por separado, bajo la condición de que ambas soluciones tuvieran el mismo valor en los puntos límites en los que el potencial cambia, garantizando así la continuidad de la solución.

Para solucionar la ecuación de difusión de partículas no interactuantes (ecuación para el oscilador con potencial constante) se planteó un hiperespacio de seis dimensiones, en el que se ubicó la ecuación o hipersuperficie de cinco dimensiones, mientras para la ecuación correspondiente al potencial de Hooke se utilizó un hiperespacio de siete dimensiones, donde la hipersuperficie fue de seis dimensiones. Luego, con esa base teórica se utilizó el método de grupos de Lie para encontrar los coeficientes infinitesimales y generadores de simetría, que como se dijo en la explicación del método, numeral 2.5, son las funciones de “paso” y dirección que en conjunto marcan caminos sobre la hipersuperficie. Sólo se seleccionaron los caminos sobre los cuales los coeficientes infinitesimales dejaban invariantes las soluciones de la ecuación; es necesario indicar que estos coeficientes son transformaciones implícitas y que esta condición de invariabilidad se logra bajo la condición de simetría (paso 4 en numeral 2.5.1). La aplicación del criterio de simetría a la ecuación característica del generador de simetrías proporcionó una ecuación diferencial que contenía todas las condiciones para encontrar soluciones invariantes y esta ecuación diferencial, en conjunto con la ecuación del oscilador armónico truncado hizo que el problema se simplificara debido a que solucionar estas dos ecuaciones acopladas es un caso más sencillo que solucionar la ecuación del oscilador.

Luego de tener las soluciones invariantes para el oscilador, una para cada tipo de potencial, se empleó la condición de que la solución fuera continua en el límite en el que el potencial cambia y la condición de normalización; esto hizo posible encontrar las constantes de normalización. Por último se graficó para diferentes valores de la constante de Lie hasta determinar el papel que tiene en el comportamiento de la solución; se observó que corre la solución hacia la izquierda y derecha y se seleccionó el valor necesario para que el máximo de la solución se encontrara en  $x = 0$  (ver figura 2-2). La solución obtenida se contrastó con [27], observándose que efectivamente ambas soluciones se superponen. Adicionalmente y de manera sorprendente se observó que el error en la solución, existente tanto en el método de grupos de Lie como en el de Araujo y Drigo Filho [27] y que existe a raíz de la aparición de funciones de error durante el proceso de normalización, es menor si se usan el método de grupos de Lie. En conclusión, la comparación de la solución obtenida por grupos de Lie con la solución de Araujo y Drigo Filho [27] dio certeza sobre la validez del uso de este método para solucionar la ecuación de Fokker-Planck y por lo tanto brindó seguridad para buscar soluciones a la ecuación de la onda de choque en medios gaseosos, objetivo principal de este trabajo.

## 5.2 Problema de una onda de choque en un medio gaseoso

Este trabajo inició con la construcción de una ecuación para la densidad de partículas en una onda de choque en un medio gaseoso, cuyas variables independientes son posición, velocidad y tiempo; dicha ecuación es una ecuación de Fokker-Planck, a la cual se le encontraron soluciones analíticas particulares usando el método de grupos de simetría o grupos de Lie. Hubo varias razones por las cuales se usó este método: en primer lugar, brinda soluciones analíticas, que son, a la manera de pensar del autor, soluciones más elegantes que las soluciones numéricas. En segundo lugar, las bases de este método hacen posible vincular las ecuaciones diferenciales con la geometría y así dar un sentido geométrico al proceso de obtención de soluciones. En tercer lugar, el método demostró ser válido para solucionar ecuaciones de Fokker-Planck, gracias al resultado obtenido para el caso del oscilador armónico truncado.

La construcción de la ecuación de la onda de choque comenzó con el análisis dinámico de una partícula de gas en movimiento e interacción con otras; basado en dicho análisis y

bajo las consideraciones del numeral 3.1 se construyó la ecuación de Langevin para una partícula. Se planteó la ecuación de Fokker-Planck para la onda de choque, donde los momentos de las distribuciones de probabilidad se obtuvieron de la ecuación de Langevin y de la aplicación de la relación de fluctuación-disipación. Se vinculó también la densidad de partículas con su velocidad usando el modelo de tráfico y con todo esto se obtuvo finalmente una ecuación diferencial parcial no lineal de segundo orden en tres variables independientes, la ecuación de la onda de choque.

La solución de esta ecuación comenzó con la construcción de un hiperespacio de nueve dimensiones para la ecuación diferencial que bajo la visión de este método es una hipersuperficie de 8 dimensiones. Se buscaron funciones de “paso” para las variables básicas del problema, es decir; posición, velocidad, tiempo y densidad que son los ejes básicos del hiperespacio; estas funciones de paso son transformadas invariantes implícitas para las soluciones del problema. Se construyó también una ecuación general que marcara la dirección a seguir sobre la hipersuperficie, dirección necesaria para encontrar las soluciones invariantes; esta ecuación de “dirección” es un campo vectorial, el cual se planteó inicialmente para las dimensiones básicas y se extendió luego a todas las demás dimensiones del hiperespacio. Luego, como parte necesaria e indispensable de este método, se utilizó el criterio de simetría para encontrar, de todas las funciones de “paso” posibles (coeficientes infinitesimales) y todas las funciones de “dirección” posibles (campos vectoriales), sólo aquellas que llevaban a soluciones invariantes. Finalmente, el uso del criterio de simetría sobre la ecuación característica del campo vectorial, también llamado generador de simetrías, llevó a tener una ecuación diferencial que contenía todas las condiciones que plantea el método de grupos de Lie; esta ecuación en conjunto con la ecuación original de la onda de choque formaron un sistema de ecuaciones acopladas para el problema, mucho más fácil de solucionar que la ecuación original.

Se escogieron algunos de los generadores de simetría encontrados; esto equivale a elegir algunas de las direcciones sobre las cuales las soluciones son invariantes. Con estos generadores se obtuvieron ocho soluciones, de las cuales cuatro resultaron ser no triviales. De la llamada octava solución invariante se obtuvieron resultados que se pudieron contrastar con los trabajos experimentales de Linzer y Horning [30] y [31]; la importancia que tiene este trabajo experimental para el presente trabajo teórico radica en que los resultados de Linzer y Horning [30] y [31] han sido usados por décadas como referente

para probar la validez de diferentes métodos teóricos, siendo hasta hoy un referente importante en el tema de ondas de choque (Elizarova, Shirokov y Montero [5] se basan en estos resultados experimentales para argumentar su propio método numérico).

Hasta la fecha de escritura de este documento no se ha encontrado información que indique que el presente trabajo se haya hecho antes, por lo que se considera que se trata de un trabajo original.

El método de grupos de Lie aplicado a la solución del problema de ondas de choque en gases demostró ser una manera viable de abordar este tema, no sólo porque se pudo observar consistencia con datos experimentales, sino también porque las soluciones que proporciona son analíticas. Si bien se observó que las soluciones obtenidas divergen de los datos experimentales para grandes números mach, el resultado para valores entre 1 y 2,5 es bueno, haciendo de este método una posible forma de abordar problemas similares en el futuro. De lo anterior puede surgir un nuevo interés de investigación, como es determinar las razones por las cuales el modelo teórico no predice bien los resultados experimentales fuera de este rango de velocidades y qué cambios son necesarios en este modelo para describir completamente el fenómeno. Otros intereses de investigación consisten en el empleo del teorema Noether para encontrar otro tipo de soluciones, así como la inclusión de velocidades de rotación en el modelo y la posibilidad de considerar partículas del mismo tamaño tanto para el gas a alta velocidad, como para el gas en estado estacionario.

La constante que resultó de la aplicación del método de grupos de Lie en la solución para el espesor de la onda, representa el inverso del tiempo de formación de dicha onda. La carencia de datos experimentales para determinar este valor hizo difícil la comparación del modelo con los experimentos. De aquí surge otro interés de investigación, que consiste en buscar una manera alternativa para calcular este valor, ya sea teórica o experimental.

La llamada séptima solución invariante, fue la solución más compleja que se obtuvo, debido a que se encuentra expresada por medio de una ecuación en funciones de Airy de varios tipos, con argumentos polinómicos en las tres variables independientes, en la que es complicado evaluar las condiciones de frontera del problema, de la manera como se pueden evaluar las condiciones en las otras soluciones. De aquí surge otra

recomendación, que consiste en analizar esta solución en particular para determinar la mejor manera de abordarla y encontrar las constantes de integración, la constante de Lie y deducir la información que brinda sobre el fenómeno.

## 6 Bibliografía

- [1] S. R. B. y. J. G. Kirkwood, «Theory of the propagation of shock waves,» *Phys. Rev*, vol. 71, nº 9, p. 606, 1947.
- [2] J. K. C. y. B. Goldstein, «Modification of the Rankine-Hugoniot relations for shocks in space,» *Journal of Geophysical Research*, vol. 77, nº 28, pp. 5455-5466, 1972.
- [3] S. L. G. y. R. Saurel, «Rankine-Hugoniot relations for shocks in heterogeneous mixtures,» *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 575, pp. 495-507, 2007.
- [4] J. Anderson, *Fundamentals of aerodynamics*, McGraw-Hill, 2001.
- [5] I. A. S. y. S. M. T. G. Elizarova, «Numerical simulation of shock wave structure in argon, helium and nitrogen,» *AIP Conference Proceedings*, vol. 762, pp. 1253-1258, 2005.
- [6] T. T. y. R. B.-Z. T. Beatus, «Burger's shock waves and sound in a 2D microfluidic droplets ensemble,» *Phy. Rev. Letters*, vol. 103, p. 114502, 2009.
- [7] R. F.-F. y. J. F. d. I. Mora, «Solution of the Fokker Planck equation for the shock wave problem,» *Journal of Statistical Physics*, vol. 48, nº 3, pp. 901-917, 1987.
- [8] J. G. K. y. P. Schneider, «Particle acceleration at shocks: A monte carlo method,» *The Astrophysical Journal*, vol. 322, pp. 256-265, 1987.
- [9] C. Floris, «Numeric solution of the Fokker-Planck-Kolmogorov equation,» *Engineering*, vol. 5, nº 12, pp. 975-988, 2013.
- [10] P. Krehl, *History of shock waves, explosions and impact, a chronological and biographical reference*, Springer-Verlag, 2009.

- [11] D. A. Tidman, «Structure of a shock wave in fully ionized hydrogen,» *Phys. Rev.*, vol. 111, p. 1439, 1958.
- [12] G. D. y. V. S. K.S. Viswanathan, «The structure of strong shock waves using the Fokker-Planck model,» *Proceedings of the Indian Academy of Sciences*, vol. 74, nº 3, pp. 115-132, 1971.
- [13] K. Niu, «Structure of plane shock wave in plasma,» *Physical Society of Japan*, vol. 19, nº 6, pp. 999-1009, 1964.
- [14] M. Scott, *Applied stochastic processes in science and engineering*, Waterloo, 2013.
- [15] F. I. R. I. M. R. M. S. M. y. R. Y. J. M. de Lejarza, «Proyecto CEACES,» Universidad de Valencia, [En línea]. Available: <http://www.uv.es/ceaces/base/descriptiva/covarianza.htm>. [Último acceso: 9 Febrero 2016].
- [16] G. D. Birkhoff, «Proof of the ergodic theorem,» *Proceedings of the national Academy of Sciences of the United States of America (PNAS)*, vol. 17, nº 12, pp. 656-660, 1931.
- [17] N. Wiener, «Generalized harmonic analisis,» *Acta Mathematica*, vol. 55, pp. 117-258, 1930.
- [18] A. Khintchine, «Korrelationstheorie der stationären stochastischen prozesse,» *Mathematische Annalen*, vol. 109, pp. 604-615, 1934.
- [19] R. Howard, *Dynamic probabilistic systems*, New York: Dover Publications Inc., 2007.
- [20] A. Kolmogoroff, «Über die analytischen Methoden in der Wahrscheinlichkeitsrechnung,» *Mathematische Annalen*, vol. 104, pp. 415-458, 1931.
- [21] I. L. y. A. I. Zotin, *Thermodynamics and Kinetics of biological processes*, Berlin: Walter de Gruyter, 1982.
- [22] A. Tresse, «Sur les invariants différentiels des groupes continus de transformations,» *Acta Math*, vol. 18, pp. 1-88, 1894.
- [23] P. Olver, *Applications of the Lie Groups to differential equations*, New York: Springer-Verlag, 1986.
- [24] F. Oliveri, «Lie symmetries of differential equations: classical results and recent contributions,» *Symmetry*, vol. 2, pp. 658-706, 2010.

- [25] F. J. y. A. P. H.H. Ortíz, «Algunas soluciones exactas para la ecuación unidimensional de Fokker-Planck usando simetrías de Lie,» *Revista de Matemáticas: Teoría y Aplicaciones*, vol. 22, nº 1, pp. 1-20, 2015.
- [26] A. Einstein, «On the movement of small particles suspended in stationary liquids required by the molecular-kinetic theory of heat,» *Annalen der Physik*, vol. 17, pp. 549-560, 1905.
- [27] M. T. A. y. E. D. Filho, «Approximate solution for Fokker-Planck equation,» *Condensed Matter Physics*, vol. 18, pp. 1-12, 2015.
- [28] M. T. A. y. E. D. Filho, «A general solution of the Fokker-Planck equation,» *Journal of Statistical Physics*, vol. 146, pp. 610-619, 2012.
- [29] J. García, «Cornell University Library,» 11 Junio 2007. [En línea]. Available: <https://arxiv.org/abs/cond-mat/0701242>. [Último acceso: 20 Abril 2015].
- [30] M. L. y. D. F. Horning, «The structure of shock fronts in Argon and Nitrogen,» *Phy. Fluids*, vol. 6, pp. 1661-1668, 1963.
- [31] L. M. y. H. D.F., «The structure of shock fronts in argon and nitrogen,» Princeton University, Princeton, 1963.
- [32] R. F. y. T. L., «Measurement of shock wave thickness by the electron beam fluorescence method,» University of California, Berkeley, 1965.



