Universidad Simón Bolívar

LA-CoNGA Physics

Procesos fuera del Equilibrio

Profesora
Gloria Buendía

27 de abril de 2023

Contenido General

1. Introducción

Los sistemas fuera del equilibrio se mantienen intercambiando materia, energía, información, etc, con su entorno. Estos procesos no satisfacen balance detallado. La mayoría de los casos se pueden dividir en dos grandes grupos: a) Sistemas sometido a una "fuerza.^{ex}terna que continuamente los aleja del equilibrio. b) Sistemas mientras están en el proceso de relajamiento a un estado de equilibrio.

La mayoría de procesos que ocurren en la naturaleza están fuera del equilibrio, el comportamiento colectivo de estos sistemas es poco conocido. Algunos ejemplos

Procesos de Reacción-Difusión
Propagación de daños
Diseminación de Epidemias
Sistemas difusivos bajo fuerzas externas
Colapso de Agujeros Negros
Comportamiento de tráfico vehicular
"Glassy system"
Sistemas con estados absorbentes: configuraciones que pueden ser alcanzadas pero de las que no se puede salir. Ejm: percolación tiene una transición de fase a un estado absorbente en 1-d.

No hay un marco general para estudiar estos sistemas, cada uno se analiza independientemente.

1.1. Algunos retos encontrados al simular sistemas fuera del equilibrio

Escogencia de la dinámica: A diferencia de los sistemas en equilibrio no estamos en libertad de escoger la dinámica del modelo. Hasta ahora habiamos impuesto que nuestros algoritmos convergieran a configuraciones que , a una temperatura dada, estuvieran dadas por la probabilidad de Boltzmann, sin importarnos como se llegó a este equilibrio. Estos métodos no nos dicen nada sobre como el sistema llega al equilibrio, en general el proceso usado para llegar al equilibrio no se parece en nada al proceso real. Pero si estamos simulando un sistema fuera del equilibrio, nos interesa escoger la dinámica que mejor reproduzca el caso real.

Cuando simulamos sistemas en equilibrio, la condición de balance detallado indica que solo necesitamos saber las energías de los estados final e inicial para construir el algoritmo. Si estamos interesados en el comportamiento fuera del equilibrio, necesitamos saber como la energía varía entre los estados de la simulación. Puede ocurrir que para ir de un estado μ a un estado ν el sistema pasa por estados intermedios de mayor energía, entonces la rata de transición entre estos estados depende de la altura de esta barrera de energía (en general de forma exponencial, ley de Arrhenius).

2. Ejemplo Sistema fuera del equilibrio en 1-d . Branching Process (J. Marro and R. Dickman, Nonequilibrium Phase Transition in Lattice Models (Cambridge University Press)

Tenemos una población de individuos, $n(t) \geq 0$ que se reproduce a la rata λ y muere a la rata 1. Este sistema puede representar organismos de una colonia con una población por debajo de la máxima, neutrones en una reacción en cadena, photones en un laser, etc. n(t) se obtiene de un proceso de Markov con ratas de transición:

$$W(n \to n+1) = n\lambda \qquad\qquad W(n \to n-1) = n$$

n=0 es un estado absorbente, si todos los individuos mueren la población permanece cero para todo tiempo futuro.

Cuál es la probabilidad de tener exactamente n individuos al tiempo t?

$$\begin{aligned}\frac{\partial P_n}{\partial t} &= P_{n-1}W(n-1 \to n) + P_{n+1}W(n+1 \to n) - P_n W(n \to n-1) - P_n W(n \to n+1) \\ &= \lambda(n-1)P_{n-1} + (n+1)P_{n+1} - (1+\lambda)nP_n\end{aligned}$$

Para resolver este sistema definimos la función generatriz

$$g(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} x^n P_n(t)$$

tal que

$$\frac{\partial g}{\partial t} = \sum_{n=0}^{\infty} x^n \frac{\partial P_n}{\partial t}$$

$$\frac{\partial g}{\partial x} = \sum_{n=1}^{\infty} n x^{n-1} P_n(t) = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) x^n P_{n+1}(t)$$

sustituyendo

$$\frac{\partial g}{\partial t} = \lambda x^2 \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) x^n P_{n+1} + \frac{\partial g}{\partial x} - (1+\lambda)x \sum_{m=0}^{\infty} (n+1) x^n P_{n+1} = \\ (1-x)(1-\lambda x)\frac{\partial g}{\partial x}$$

Utilizando la condición de normalización

$$g(1,t) = \Sigma P_n(t) = 1$$

y asumiendo que al tiempo cero hay un solo individuo, n(t=0)=1 $\to g(x,0) = x$ (donde hemos tomado $P_1(0) = 1, P_n(0) = 0$ si n$\neq 1$). Si $\lambda \neq 1$ la solución es

$$g(x,t) = \frac{(1-\lambda x)e^{(1-\lambda)t} - (1-x)}{(1-\lambda x)e^{(1-\lambda)t} - \lambda(1-x)}$$

si x=0 la probabilidad de extinción es $P_0(t)$ (probabilidad de que a t la población sea cero)

$$P_0(t) = g(x=0,t) = \frac{e^{1-\lambda)t} - 1}{e^{1-\lambda)t} - \lambda}$$

Si definimos la probabilidad de supervivencia como P(t) , entonces

$$P(t) + P_0(t) = 1 \Rightarrow P(t) = 1 - P_0(t) = \frac{\lambda - 1}{\lambda - e^{(1-\lambda)t}}$$

si $\lambda < 1$ $\quad\Rightarrow e^{(1-\lambda)t} \to \infty$ y

$$P(t \to \infty) = e^{-(1-\lambda)t} \qquad \text{P(t) decae exponencialemente}$$

si $\lambda > 1$

$$P(t \to \infty) = 1 - \frac{1}{\lambda}$$

$\lambda = 1$ es un valor crítico que marca el límite entre la extinción segura y la posible supervivencia.

Entonces $P(t \to \infty)$ se puede definir como el parámetro de orden del modelo, tiene un comportamiento singular con λ, $\lambda = 1$ es el valor crítico que indica una transición de fase.

$$g(x,t)_{\lambda=1} = \frac{1 + (1-x)(t-1)}{1 + (1-x)t}$$

entonces

$$P(t)_{\lambda=1} = 1 - g(x=0,t)_{\lambda=1} = \frac{1}{1+t}$$

no se comporta como una exponencial.

El tiempo de relajación para la probabilidad de supervivencia diverge como $|1-\lambda|^{-1}$ cuando $\lambda > 1$, para $\lambda = 1$ se comporta como una potencia en lugar de una exponencial. Este comportamiento: clara distinción entre extinción y supervivencia, tiempo de relajación que diverge, y relajación tipo "slowing down", son típicos de el comportamiento de un sistema en las cercanías de un punto crítico.

Este modelo no permite la existencia de un estado estable no trivial. El tamaño promedio de la población se obtiene de

$$< n(t) > = \sum_{n=0}^{\infty} n P_n(t)$$

recordando que

$$\sum_{n=0}^{\infty} x^n P_n(t) = g(x,t) \qquad \Rightarrow \frac{\partial g(x,t)}{\partial x} = \sum_{n=0}^{\infty} n x^{n-1} P_n(t)$$

si x=1

$$\left.\frac{\partial g(x,t)}{\partial x}\right|_{x=1} = \sum_{n=0}^{\infty} n P_n(t) = < n(t) >$$

de la expresión obtenida previamente para g(x,t) y asumiendo que g(x,t=0)=x (había un solo individuo a t=0)

$$\frac{\partial g(x,t)}{\partial x}\Big|_{x=1} = \frac{\partial}{\partial x}\frac{(1-\lambda x)e^{(1-\lambda)t}-(1-x)}{(1-\lambda x)e^{(1-\lambda)t}-\lambda(1-x)} = \frac{1}{e^{(1-\lambda)t}}$$

$$\Rightarrow < n(t) > = e^{(\lambda-1)t}$$

si $\lambda > 1$ la población crece sin límites. Para prevenir esto debemos incluir un término de saturación, por ejemplo la rata de crecimiento debe declinar para n grande, debido a falta de recursos. Esto se corrige en módelos de crecimiento y muerte en redes, donde los hijos solo pueden aparecer en sitios vacantes (no puede haber doble ocupación). Esto previene el crecimiento exponencial, por que la densidad de población no puede ser mayor que 1 (todos los sitios de la red llenos). Este modelo tiene un estado estable no trivial para λ grande.

2.1. Modelo de población en una red en 1-d

Regla: un sitio vacio cercano a uno lleno se ocupa con probabilidad λ mientras que un sitio lleno cercano a uno vacio se llena con probabilidad 1. Supongamos que comenzamos nuestra simulación con un solo sitio ocupado. Un tiempo despues el sistema puede estar en uno de dos estados: un estado absorbente (sin partículas), ó uno consistente en una línea continua con n sitios ocupados, sin gaps.

El número de partículas es dado por una caminata aleatoria, que comienza en n(t=0)=1 con un estado absorbente y con un bias a la derecha, n>0 propocional a $\lambda - 1$. Si $\lambda < 1$, n(t) eventualmente será cero, la población se extinguirá. Si $\lambda > 1$ hay una probabilidad distinta de cero para la supervivencia a $t \to \infty$.

3. Perspectivas

Los modelos de población, ejemplos de sistemas fuera del equilibrio, tienen una transición de fase entre un estado activo (supervivencia) y un estado absorbente (estado vacio del que no se puede salir). Note que este es un modelo no basado en un Hamiltoniano, que tiene una dinámica altamente anisotrópica (las dos fases resultantes no son simétricas). Recordemes algunas de las características de los fenómenos críticos en sistemas en equilibrio

a) Universalidad: singularidades cerca de los puntos críticos están determinadas por un pequeño número de características: dimensión espacial, dimensionalidad y simetría del parámetro de orden, rango de las interacciones. El comportamiento cerca de la criticalidad es insensible a detalles como estructura molecular o interacciones. La universalidad es debida a que la longitud de correlación, ξ diverge en el punto crítico. El tiempo de relajación también diverge.

b) Hay relaciones de escalamiento entre los distintos exponentes críticos. Las singularidades y los puntos críticos que marcan las transiciones de fase solo aparecen en el límite de tamaño infinito. Cerca del punto crítico ξ es muy grande (pero limitado por el tamaño de la red), las propiedades intensivas del sistema dependen fuertemente del tamaño: escalamiento de tamaño finito.

Cuantas de estas características se pueden extender a las transiciones de fase en sistemas fuera del equilibrio? Muchas de ellas, pero no todas, entre otras cosas ahora la termodinámica no tiene sentido. No existe una condición de balance detallado, ocurren transiciones de fase en sistemas 1d, estructuras espaciales novedosas que dependen de la historia del sistema, etc. Todo un mundo nuevo de comportamientos.