





Introducción a los métodos estocásticos y análisis fractal

Introducción a los métodos estocásticos y análisis fractal / Edgardo Jonathan Suárez-Domínguez, Víctor Manuel García-Izaguirre, Yolanda Guadalupe Aranda-Jiménez, Elena Francisca Izquierdo-Kulich coordinadores .—Ciudad de México : Colofón ; Universidad Autónoma de Tamaulipas , Facultad de Arquitectura, Diseño y Urbanismo, 2021.

138 p.; 20x23 cm.

1. Procesos estocásticos. 2. Análisis fractal. 3. Probabilidad.

LC: QA274.2

DEWEY: 519.23

Universidad Autónoma de Tamaulipas

Matamoros SN, Zona Centro Ciudad Victoria, Tamaulipas C.P. 87000

D. R. © 2021

Consejo de Publicaciones UAT

Tel. (52) 834 3181-800 • extensión: 2948 • www.uat.edu.mx



Fomento Editorial Una edición del Departamento de Fomento Editorial de la Universidad Autónoma de Tamaulipas

ISBN UAT: 978-607-8750-29-0

Colofón S.A. de C.V.

Franz Hals núm. 130, Alfonso XIII. Delegación Álvaro Obregón

C. P. 01460 Ciudad de México.

www.colofonlibros.com • colofonedicionesacademicas@gmail.com

ISBN Colofón: 978-607-635-204-5

Publicación financiada con recurso PROFEXCE 2020

Se prohíbe la reproducción total o parcial de esta obra incluido el diseño tipográfico y de portada, sea cual fuera el medio, electrónico o mecánico, sin el consentimiento del Consejo de Publicaciones UAT.

Impreso en México • Printed in Mexico

El tiraje consta de 350 ejemplares

Este libro fue dictaminado y aprobado por el Consejo de Publicaciones UAT mediante un especialista en la materia. Asimismo fue recibido por el Comité Interno de Selección de Obras de Colofón Ediciones Académicas para su valoración en la sesión del segundo semestre 2020, se sometió al sistema de dictaminación a "doble ciego" por especialistas en la materia, el resultado de ambos dictámenes fue positivo.

"PARA CREAR COSAS BUENAS
PRIMERO HAY QUE CREER
EN ELLAS"



UNIVERSIDAD
AUTÓNOMA DE
TAMAULIPAS
—1950-2020—

Introducción a los métodos estocásticos y análisis fractal

Edgardo J. Suárez-Domínguez

Víctor M. García-Izaguirre

Yolanda G. Aranda-Jiménez

Facultad de Arquitectura, Diseño y Urbanismo
Universidad Autónoma de Tamaulipas, México

Elena F. Izquierdo-Kulich

Facultad de Química

Universidad de la Habana, Cuba





Ing. José Andrés Suárez Fernández
PRESIDENTE

Dr. Julio Martínez Burnes
VICEPRESIDENTE

Dr. Héctor Manuel Cappello Y García
SECRETARIO TÉCNICO

C.P. Guillermo Mendoza Cavazos
VOCAL

Dra. Rosa Issel Acosta González
VOCAL

Lic. Víctor Hugo Guerra García
VOCAL

Consejo Editorial del Consejo de Publicaciones de la Universidad Autónoma de Tamaulipas

Dra. Lourdes Arizpe Slogher • Universidad Nacional Autónoma de México | Dr. Amalio Blanco • Universidad Autónoma de Madrid. España | Dra. Rosalba Casas Guerrero • Universidad Nacional Autónoma de México | Dr. Francisco Díaz Bretones • Universidad de Granada. España | Dr. Rolando Díaz Lowing • Universidad Nacional Autónoma de México | Dr. Manuel Fernández Ríos • Universidad Autónoma de Madrid. España | Dr. Manuel Fernández Navarro • Universidad Autónoma Metropolitana. México | Dra. Juana Juárez Romero • Universidad Autónoma Metropolitana. México | Dr. Manuel Marín Sánchez • Universidad de Sevilla. España | Dr. Cervando Martínez • University of Texas at San Antonio. E.U.A. | Dr. Darío Páez • Universidad del País Vasco. España | Dra. María Cristina Puga Espinosa • Universidad Nacional Autónoma de México | Dr. Luis Arturo Rivas Tovar • Instituto Politécnico Nacional. México | Dr. Aroldo Rodríguez • University of California at Fresno. E.U.A. | Dr. José Manuel Valenzuela Arce • Colegio de la Frontera Norte. México | Dra. Margarita Velázquez Gutiérrez • Universidad Nacional Autónoma de México | Dr. José Manuel Sabucedo Cameselle • Universidad de Santiago de Compostela. España | Dr. Alessandro Soares da Silva • Universidad de São Paulo. Brasil | Dr. Akexandre Dorna • Universidad de CAEN. Francia | Dr. Ismael Vidales Delgado • Universidad Regiomontana. México | Dr. José Francisco Zúñiga García • Universidad de Granada. España | Dr. Bernardo Jiménez • Universidad de Guadalajara. México | Dr. Juan Enrique Marcano Medina • Universidad de Puerto Rico-Humacao | Dra. Ursula Oswald • Universidad Nacional Autónoma de México | Arq. Carlos Mario Yori • Universidad Nacional de Colombia | Arq. Walter Debenedetti • Universidad de Patrimonio. Colonia. Uruguay | Dr. Andrés Piqueras • Universitat Jaume I. Valencia, España | Dr. Yolanda Troyano Rodríguez • Universidad de Sevilla. España | Dra. María Lucero Guzmán Jiménez • Universidad Nacional Autónoma de México | Dra. Patricia González Aldea • Universidad Carlos III de Madrid. España | Dr. Marcelo Urrea • Revista Latinoamericana de Psicología Social | Dr. Rubén Ardila • Universidad Nacional de Colombia | Dr. Jorge Gissi • Pontificia Universidad Católica de Chile | Dr. Julio F. Villegas • Universidad Diego Portales. Chile | Ángel Bonifaz Ezeta • Universidad Nacional Autónoma de México

Índice

1: INTRODUCCIÓN A LOS MÉTODOS DE MODELACIÓN ESTOCÁSTICA | 11

- 1.1 Definición de probabilidad y variables estocásticas | 13
- 1.2 Funciones de probabilidad | 17
 - 1.2.1 Función de distribución normal o gaussiana | 17
 - 1.2.2 Distribución Chi-cuadrado | 19
 - 1.2.3 La distribución de probabilidad exponencial | 20
 - 1.2.4 La función de probabilidad de Weibull | 21
 - 1.2.5 La función de probabilidad gamma | 22
 - 1.2.6 Función de probabilidad beta | 23
 - 1.2.7 La distribución de probabilidad de Cauchy | 24
 - 1.2.8 Distribución de probabilidad uniforme | 25

2. PROCESOS ESTOCÁSTICOS | 27

- 2.1 Procesos estocásticos | 29
- 2.2 Procesos Markovianos | 35

3: MODELACIÓN DE LAS FLUCTUACIONES INTERNAS | 39

- 3.1 Obtención de la ecuación maestra | 41
- 3.2 Obtención de la ecuación macroscópica | 47
- 3.3 Solución de la ecuación maestra | 59

4: ECUACIÓN DE FOKKER-PLANCK | 71

- 4.1 Obtención de la ecuación de Fokker-Planck | 73
- 4.2 Relación entre la ecuación maestra y la ecuación de Fokker-Planck | 81

5: FLUCTUACIONES EXTERNAS, CONFIABILIDAD Y PROBABILIDAD DE FALLAS EN PROCESOS TECNOLÓGICOS | 87

- 5.1 Ecuaciones diferenciales estocásticas y método de Montecarlo | 89
- 5.2 Modelación estocástica aplicando métodos analíticos | 89
- 5.3 Método de Montecarlo | 95
- 5.4 Confiabilidad y probabilidad de fallas en procesos tecnológicos | 99

6: DIMENSIÓN FRACTAL Y SU EMPLEO PARA EL ESTUDIO DE SUPERFICIES SÓLIDAS | 107

- 6.1 Concepto de dimensión | 109
- 6.2 Estimación de la dimensión de una línea irregular | 115
- 6.3 Definición de objetos fractales | 117
- 6.4 Definición de dimensión fractal | 118
- 6.5 Cálculo de la dimensión fractal por el método de conteo de cajas | 119
- 6.6 Ampliación de la dimensión fractal en el estudio de superficies sólidas | 123

7: EJEMPLO DE APLICACIÓN DE LA GEOMETRÍA FRACTAL Y MÉTODOS ESTOCÁSTICOS | 129

- 7.1 Obtención del modelo mesoscópico | 131

Introducción a los Métodos
Estocásticos y Análisis Fractal



Capítulo

1

Introducción a los métodos de
modelación estocástica



1.1. Definición de probabilidad y variable estocástica

La *probabilidad* se define a partir de considerar un conjunto n de elementos con una propiedad x con valores en el intervalo $[a,b]$. En este caso, el número de elementos $n(c)$ donde se cumple que $x = c$ se define como $nP(c)$. $P(c)$ es la probabilidad de que el elemento n tenga un valor de x igual a c .

Un número aleatorio o *variable estocástica* es un objeto X definido por:

a) un conjunto de valores, donde X puede ser unidimensional, multidimensional, continua o discreta.

b) una distribución de probabilidad $P(X)$ asociada a este conjunto, donde:

$$\begin{aligned} P(X) &\geq 1 \\ \int P(X)dX &= 1 \end{aligned} \quad 1.1.1$$

La probabilidad de que una variable continua X tome valores entre $X + dX$ está dada por:

$$P(X)dX \quad 1.1.2$$

mientras que la probabilidad de que una variable discreta n tome un valor igual a a se define como:

$$P(a) = \sum_n P(n)\delta(n-a) \quad 1.1.3$$

donde δ es la función Delta de Dirac que toma valor igual a 1 cuando su argumento es igual a 0, mientras que es igual a 0 para todos los demás valores.

Una variable estocástica queda completamente definida por el conjunto de valores que puede tomar y su función de probabilidad correspondiente.

Por otra parte, la función de distribución de probabilidad puede ser expresada de forma explícita o en función de sus momentos m , definidos como:

$$1.1.4 \quad \mu_m = \int x^m P(x) dx$$

El primer momento es el valor esperado, mientras que el segundo momento se relaciona con el cuadrado de la desviación media o varianza a partir de la expresión:

$$1.1.5 \quad \sigma^2 = \mu_2 - (\mu_1)^2$$

La teoría de la probabilidad se basa en la *transformación de variables*. Esencialmente esto consiste en una colección de técnicas para transformar una distribución de probabilidad *a priori* en otra *a posteriori*. Cualquier aplicación a un fenómeno real se basa en tres pasos fundamentales:

1. Postular una distribución para la variable independiente.
2. Realizar una apropiada transformación matemática.
3. Comparar la distribución obtenida con las observaciones.

Sea X una variable estocástica con una distribución de probabilidad $P(X)$ conocida y una variable Y que es función de X , por lo que Y será también una variable estocástica. La función de probabilidad asociada a Y se define como:

$$1.1.6 \quad P(Y) = \int \delta(f(X) - Y) P(X) dX$$

Ejercicio resuelto 1.1

Se tiene una variable estocástica X cuya función de probabilidad está dada por:

$$\begin{aligned} P(X) &= \exp(-X) & 1.1.7 \\ X &= [0;1] \end{aligned}$$

Se conoce que la variable Y depende de X de acuerdo con la relación

$$Y = X^2 \quad 1.1.8$$

Determine la función de probabilidad asociada a Y .

Determine la función de probabilidad asociada a Y .

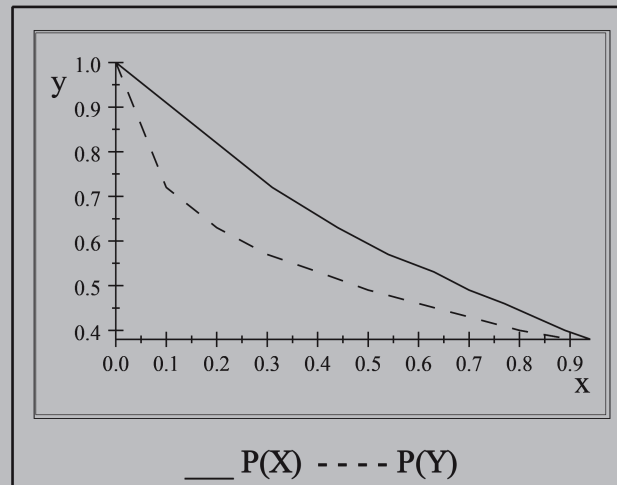
Solución:

La función de probabilidad asociada a Y está definida de acuerdo a la ecuación (1.1.6), de forma tal que:

$$P(Y) = \int \delta(X^2 - Y) \exp(-X) dX \quad 1.1.9$$

donde, de acuerdo con el intervalo definido para X , el intervalo de valores posibles de Y se encuentra entre 0 y 1. Debido a la presencia de la función delta de Dirac, este problema se va a resolver de forma numérica. Para esto se definen los posibles valores que puede tomar la variable Y , para cada uno de estos se determina el valor de X correspondiente y la probabilidad asociada a X será la correspondiente a Y .

El comportamiento obtenido se muestra en la siguiente figura:



Ejercicio propuesto 1.1

Se tiene una variable estocástica v cuyo valor se encuentra entre 10 y 40 con una función de probabilidad normal con valor esperado 15 y desviación estándar de 5. Se conoce que a es función de v de acuerdo con:

$$a = 3v^2 - v$$

¿Cual es la probabilidad de que el valor de a sea igual a 660?

Respuesta: 0.08

1.2. Funciones de probabilidad

1.2.1. Función de distribución normal o gaussiana

La función de *probabilidad normal* se define:

$$P(X) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \quad 1.2.1.1$$

donde μ es el valor esperado y σ^2 la varianza.

Relacionada con esta, se define la función de probabilidad normal acumulativa, dada por:

$$P(-\infty < X < x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x \exp\left(-\frac{(u-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) du \quad 1.2.1.2$$

Las gráficas de los comportamientos de la función de probabilidad normal y la función de probabilidad normal acumulativa considerando un valor esperado y varianza igual a 1, respectivamente, se muestran en las Figuras 1.2.1.1 y 1.2.1.2.

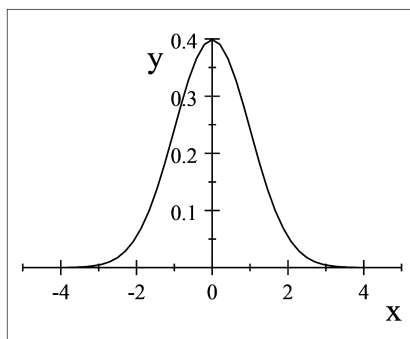


Figura 1.2.1.1

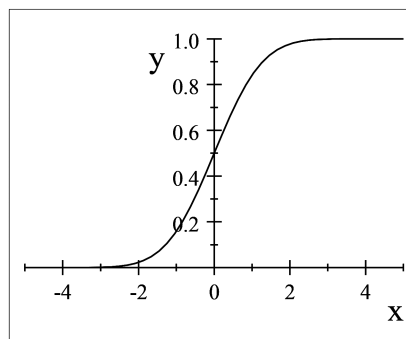


Figura 1.2.1.2

La distribución normal multivariable está dada por:

$$1.2.1.3 \quad P(\mathbf{x}) = C \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^r A_{i,j} x_i x_j - \sum_{i=1}^r B_i x_i\right)$$
$$C = (2\pi)^{-\frac{r}{2}} (\text{Det}(A))^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \mathbf{B} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}\right)$$

donde el valor esperado es un vector de r componentes definido por:

$$1.2.1.4 \quad \langle x_i \rangle = -\sum_j (A^{-1})_{i,j} B_j$$

mientras que el segundo momento está definido por una matriz de la forma:

$$1.2.1.5 \quad \langle\langle x_i x_j \rangle\rangle = (A^{-1})_{i,j}$$

1.2.2. Distribución Chi-cuadrado

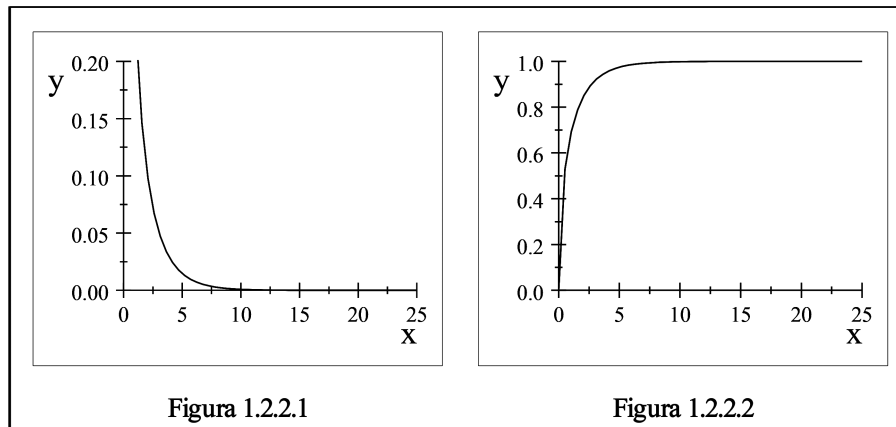
La función de *distribución Chi-cuadrado* está definida para una variable no negativa x y un parámetro μ , que define los grados de libertad, y se escribe de la forma:

$$P(x) = \frac{1}{\Gamma(\frac{\mu}{2})2^{\frac{\mu}{2}}} x^{\frac{\mu}{2}-1} \exp(-\frac{x}{2}) \quad 1.2.2.1$$

donde la distribución acumulativa es:

$$P(x) = \frac{1}{\Gamma(\frac{\mu}{2})2^{\frac{\mu}{2}}} \int_0^x u^{\frac{\mu}{2}-1} \exp(-\frac{u}{2}) du \quad 1.2.2.2$$

En las Figuras 1.2.2.1 y 1.2.2.2 se muestran la función de probabilidad chi-cuadrado y su función de probabilidad acumulativa.



1.2.3. La distribución de probabilidad exponencial

La distribución de *probabilidad exponencial* está definida por:

$$1.2.3.1 \quad P(x) = \frac{1}{\mu} \exp\left(\frac{-x}{\mu}\right)$$

y su correspondiente función acumulativa:

$$1.2.3.2 \quad P(X) = \frac{1}{\mu} \int_0^x \exp\left(\frac{-u}{\mu}\right) du = 1 - \exp\left(\frac{-x}{\mu}\right)$$

Estas funciones se muestran en las Figuras 1.2.3.1 y 1.2.3.2.

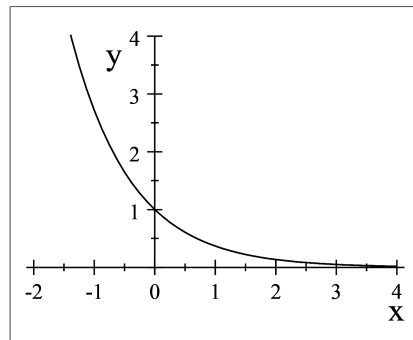


Figura 1.2.3.1

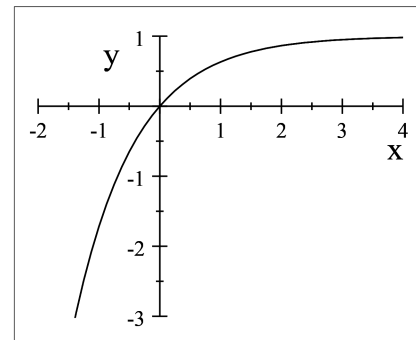


Figura 1.2.3.2

1.2.4. La función de probabilidad de Weibull

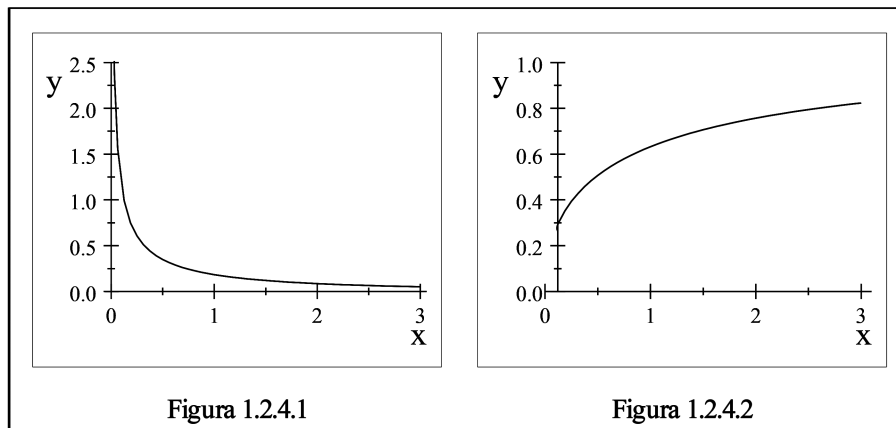
La función de *probabilidad de Weibull* con parámetros a y b está definida por:

$$P(u) = ab^{-a}u^{a-1} \exp(-u^a b^{-a}) \quad 1.2.4.1$$

y su correspondiente distribución acumulativa:

$$P(x) = ab^{-a} \int_0^x u^{a-1} \exp(-u^a b^{-a}) du = 1 - \exp(-x^a b^{-a}) \quad 1.2.4.2$$

Estas funciones de probabilidad se muestran en las Figuras 1.2.4.1 y 1.2.4.2.



1.2.5. La función de probabilidad gamma

La función de *probabilidad gamma* con parámetros a y b se define como:

$$1.2.5.1 \quad P(u) = \frac{1}{b^a \Gamma(a)} u^{a-1} \exp\left(-\frac{u}{b}\right)$$

$$\Gamma(a) = \int_0^{\infty} \exp(-u) u^{a-1} du$$

y su correspondiente función acumulativa:

$$1.2.5.2 \quad P(x) = \frac{1}{b^a \Gamma(a)} \int_0^x u^{a-1} \exp\left(-\frac{u}{b}\right) du$$

Estas funciones se muestran en las Figuras 1.2.5.1 y 1.2.5.2.

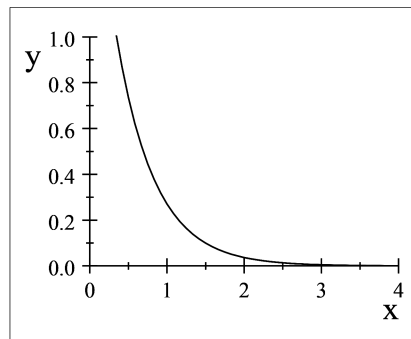


Figura 1.2.5.1

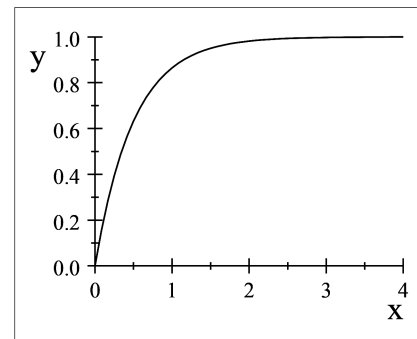


Figura 1.2.5.2

1.2.6. Función de probabilidad beta

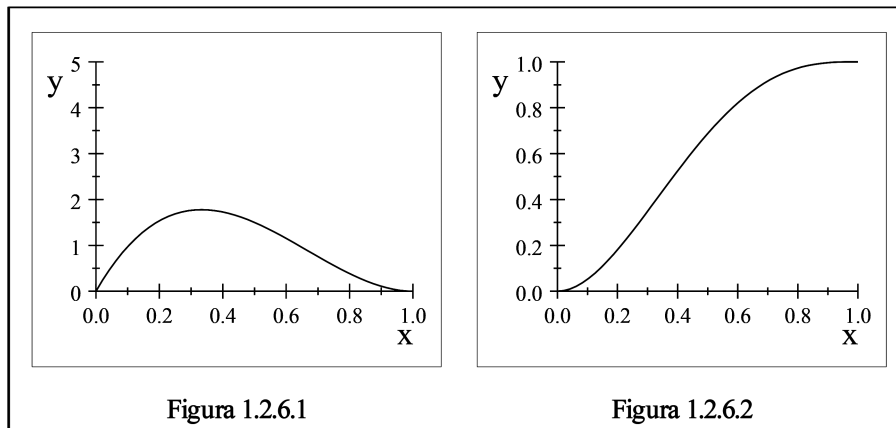
La distribución de *probabilidad beta* con parámetros v y w está dada por:

$$P(u) = \frac{u^{v-1}(1-u)^{w-1}}{B(v, w)} \quad 1.2.6.1$$

y su correspondiente función acumulativa:

$$P(x) = \frac{1}{B(v, w)} \int_0^x u^{v-1}(1-u)^{w-1} du \quad 1.2.6.2$$

Estas funciones se muestran en las Figuras 1.2.6.1 y 1.2.6.2.



1.2.7. La distribución de probabilidad de Cauchy

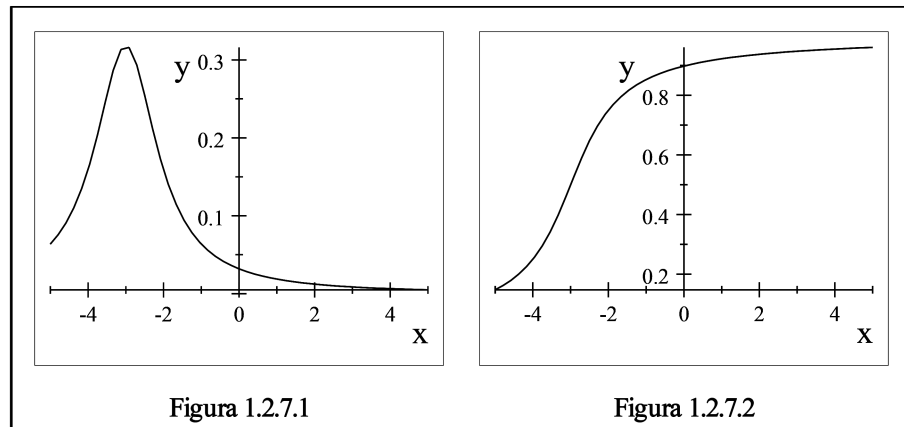
La función de *probabilidad de Cauchy* con parámetros α y β está definida por:

$$1.2.7.1 \quad P(u) = \frac{1}{\pi\beta \left(1 + \left(\frac{u-\alpha}{\beta}\right)^2\right)}$$

y su correspondiente distribución acumulativa:

$$1.2.7.2 \quad P(x) = \frac{1}{\pi\beta} \int_{-\infty}^x \left(1 + \left(\frac{u-\alpha}{\beta}\right)^2\right)^{-1} du$$

Estas funciones de probabilidad se muestran en las Figuras 1.2.7.1 y 1.2.7.2.



1.2.8. Distribución de probabilidad uniforme

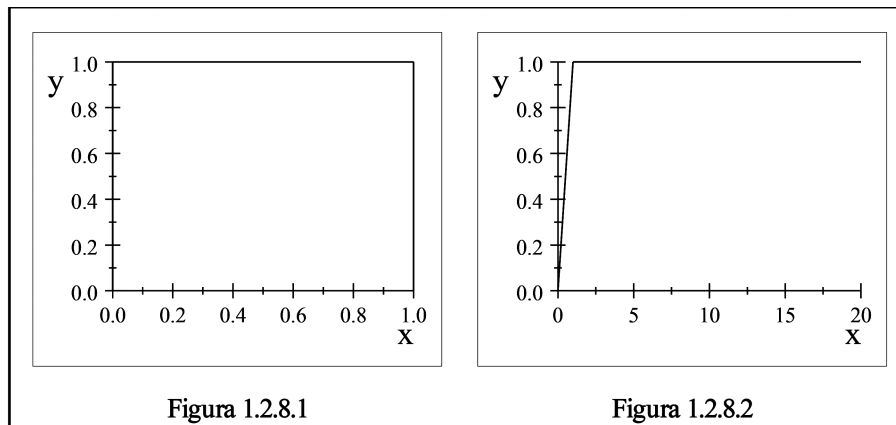
La distribución de *probabilidad uniforme* con parámetros a y b está dada por:

$$P(x;a,b) = \begin{cases} 0 & \text{if } x \leq a \\ \frac{1}{b-a} & \text{if } a \leq x \leq b \\ 0 & \text{if } b \leq x \end{cases} \quad 1.2.8.1$$

y su correspondiente función acumulativa:

$$P(x) = \begin{cases} 0 & \text{if } x \leq a \\ \frac{x-a}{b-a} & \text{if } a \leq x \leq b \\ 1 & \text{if } b \leq x \end{cases} \quad 1.2.8.2$$

Estas funciones se muestran en las Figuras 1.2.8.1 y 1.2.8.2.



Ejercicio resuelto 1.2

Se tiene una variable estocástica X , cuya función de probabilidad es normal con valor esperado de 15 y varianza 8. ¿Cuál es la probabilidad de que esta variable tome valores entre 8 y 10?

Solución

La probabilidad de que la variable se encuentre entre los intervalos especificados se define a partir de la función de distribución acumulativa correspondiente:

$$\begin{aligned}
 P(8 < x < 10) &= \frac{1}{\sqrt{8}\sqrt{2\pi}} \int_8^{10} e^{-\frac{(u-15)^2}{2 \cdot 8}} du \\
 &= \frac{1}{\sqrt{8}\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{10} e^{-\frac{(u-15)^2}{2 \cdot 8}} du - \frac{1}{\sqrt{8}\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^8 e^{-\frac{(u-15)^2}{2 \cdot 8}} du \\
 &= .03855 - 6.6642 \times 10^{-3} \\
 &= 3.1886 \times 10^{-2}
 \end{aligned}$$

Ejercicio propuesto 1.2

Se tiene una variable estocástica v cuyo valor se encuentra entre 0 y 10 cuya función de probabilidad es exponencial con un parámetro igual a 4.

¿Cuál es el valor de v que usted puede obtener con un 90% de probabilidad acumulativa?

Respuesta: 6.99

Capítulo

2

Procesos estocásticos



2.1 Procesos Estocásticos

Un proceso es un fenómeno que evoluciona con el tiempo y que se describe a partir del comportamiento de una variable. En este caso, el modelo del proceso es la ecuación matemática que representa el comportamiento de esta variable.

Sea X^* una variable estocástica y t el tiempo. Se define un proceso estocástico como aquel proceso donde la variable Y que lo describe depende del tiempo y de la variable estocástica X^* , de forma tal que Y^* es también una variable estocástica y se define de la forma:

$$Y^* = f(X^*; t) \quad 2.1$$

Cuando el valor de Y se determina para uno de los posibles valores de X , se obtiene una realización del proceso. De esta manera, un proceso estocástico se define como un conjunto de realizaciones del mismo, y queda completamente definido a partir de la probabilidad asociada a X^* , $P(y)$, o de todos los momentos de la misma. El carácter estocástico de un proceso se manifiesta en que el valor real que toma la variable fluctúa o cambia en relación con un valor promedio. En este sentido, las fluctuaciones se definen como la diferencia entre el valor esperado y el valor real, donde esta magnitud cambia aleatoriamente.

Existen dos parámetros fundamentales que se deben tomar en consideración para caracterizar a un proceso estocástico. Uno de ellos es el valor esperado de la variable Y , definido como:

$$\langle Y(t) \rangle = \int f(X^*; t) P(x) dx \quad 2.2$$

y el otro es la función de autocorrelación:

$$\begin{aligned} \kappa(t_1, t_2) &= \langle \langle Y(t_1) Y(t_2) \rangle \rangle \\ &= \langle Y(t_1) Y(t_2) \rangle - \langle Y(t_1) \rangle \langle Y(t_2) \rangle \end{aligned} \quad 2.3$$

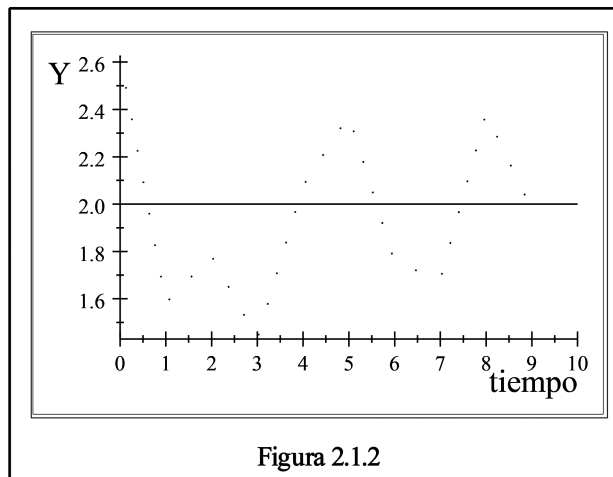
Nótese que cuando $t = t^2$ la función de autocorrelación se corresponde con la varianza σ^2 , la cual se identifica con el cuadrado de la magnitud promedio de las fluctuaciones que se producen alrededor del valor esperado o desviación estándar.

Un proceso estocástico estacionario es aquel en el cual los momentos asociados a su función de probabilidad son constantes con respecto al tiempo. Al respecto la función de autocorrelación solo depende del intervalo de tiempo considerado, existiendo un valor de este intervalo para el cual la función de autocorrelación se hace cero o despreciable, el cual se conoce como tiempo de autocorrelación.

En la naturaleza ocurren muchos fenómenos cuyas variables cambian de una manera muy complicada e irregular. No es posible determinar esta variación en detalle, pero sí es posible calcular determinados promedios, los cuales responden a leyes físicas simples. Esta función puede ser representada por un proceso estocástico. Al estudiar el fenómeno, esto puede ser abordado desde dos puntos de vista posibles. El primero es observar el comportamiento de N réplicas del mismo y promediar los resultados observados. El segundo consiste en observar un solo sistema durante mucho tiempo, separar las observaciones en N intervalos de tiempo, y promediar los resultados. Si ambos promedios coinciden, entonces el proceso es ergódico.

La propiedad de ergodicidad solo es completamente válida para el caso del estado estacionario. En el caso de procesos dinámicos, esta propiedad no puede suponerse sin antes comprobarla. De ser así hay que tomar intervalos de tiempo lo suficientemente largos como para que se aprecien las fluctuaciones, pero cortos en relación con el cambio temporal del promedio.

En la Figura 2.1.2 se muestra una realización (línea discontinua) de un proceso estocástico estacionario, donde el promedio se representa como una línea continua.



El comportamiento macroscópico regular que se observa en muchos fenómenos, a pesar de que microscópicamente ocurren procesos muy complicados, es el resultado de que lo que se observa es en realidad el comportamiento del promedio de un gran número de partículas microscópicas. La naturaleza aproximada de las leyes macroscópicas o deterministas, que no toman en cuenta de forma explícita el comportamiento microscópico, se manifiesta en la presencia de fluctuaciones alrededor de los valores deterministas. Estas fluctuaciones internas, resultado de los fenómenos que ocurren al nivel microscópico, escalan con el tamaño del sistema. Cuando el tamaño de las partículas es despreciable en relación con el tamaño del sistema, estas fluctuaciones internas son despreciables, de ahí la validez de las leyes deterministas.

La razón por la cual se observan estados que no cambian con el tiempo a pesar de que sí tienen lugar procesos a escala microscópica se debe a que, como los cambios al nivel microscópico tienen lugar a una velocidad muy alta, los estados macroscópicos llegan a su distribución de equilibrio rápidamente, de forma que a escala macroscópica parece como si el estado del sistema no cambiara con el tiempo. En este caso, el estado macroscópico en realidad está compuesto por estados de equilibrio que se suceden rápidamente uno después de otro. Esto se conoce como la consideración de la aleatoriedad repetida, y es imprescindible para explicar la irreversibilidad.

En cuanto a los sistemas abiertos, el comportamiento estocástico de la variable que lo describe puede ser una consecuencia de la incidencia de una variable o fuerza externa de naturaleza estocástica. En esta situación, los cambios con respecto al valor promedio se denominan fluctuaciones externas, ya que su origen es independientemente de los procesos que tienen lugar a escala microscópica. A diferencia de las fluctuaciones internas, las externas no dependen del tamaño del sistema, sino de las características estocásticas de la variable externa.

Cuando se obtiene un modelo matemático en el cual se toman en consideración las fluctuaciones internas, se denomina modelo mesoscópico. Cuando se toman en cuenta las fluctuaciones externas, se llama modelo estocástico.

Ejercicio resuelto 2.1

Se tiene un proceso estacionario estocástico Y que depende de X de forma lineal, donde la función de probabilidad asociada a X es normal o gaussiana. Demuestre que la función de probabilidad asociada a Y es también normal o gaussiana.

Solución

La relación existente entre las variables dependiente e independiente se expresa de la forma:

$$Y = aX$$

donde a es constante.

De acuerdo con la ecuación (2.1.1) y recordando que $\int P(X) = 1$, se obtiene:

$$\begin{aligned}\langle Y \rangle &= \int (aX) P(X) \\ &= a \int (X) P(X) \\ &= a \langle X \rangle\end{aligned}$$

para el segundo momento:

$$\begin{aligned}\langle\langle Y \rangle\rangle &= \int (aX)^2 P(X) \\ &= a^2 \int (X^2) P(X) \\ &= a^2 \langle\langle X \rangle\rangle\end{aligned}$$

para los momentos $m > 2$ se obtiene:

$$\begin{aligned}\langle Y^m \rangle &= \int (aX)^m P(X) \\ &= a^m \int (X^m) P(X) \\ &= a^m \langle X^m \rangle\end{aligned}$$

Como $P(x)$ es gaussiana, los momentos de orden mayores a dos se anulan, y lo mismo sucederá entonces con los momentos asociados a $P(y)$. De aquí se deduce que el proceso estocástico Y queda completamente descrito a partir de la media y la varianza, y por lo tanto, su función de probabilidad es gaussiana.

Ejercicio propuesto 2.1

Se conoce que la función de probabilidad asociada a un proceso estocástico estacionario es normal, con valor esperado igual a 10 y varianza de 9.

Determine la probabilidad de fallas de este proceso si se conoce que el valor de la variable de salida se debe encontrar entre 11 y 12.

Respuesta: 99.8%

2.2 Procesos Markovianos

La probabilidad condicional $P(y_{n+1}, t_{n+1} / y_n, t_n; y_{n-1}, t_{n-1}, \dots, y_0, t_0)$ representa la probabilidad de que Y tome el valor de Y_{n+1} en el tiempo futuro t_{n+1} cuando en el presente (t_n) tiene el valor Y_n y ha tomado los valores Y_{n-1}, \dots en los tiempos pasados t_{n-1}, \dots . En cierto sentido, esta probabilidad relaciona el comportamiento futuro del proceso $P(y_0, 0) = \delta(y_0)$ en función del comportamiento presente (Y_n) y del comportamiento pasado ($Y_{n-i}, i > 1$).

Un proceso estocástico es markoviano cuando se cumple la siguiente relación:

$$P(y_{n+1}, t_{n+1} / y_n, t_n; y_{n-1}, t_{n-1}, \dots, y_0, t_0) = P(y_{n+1}, t_{n+1} / y_n, t_n) \quad 2.2.1$$

El significado físico de la ecuación (2.2.1) es: El comportamiento futuro de un proceso depende de su comportamiento presente y no del comportamiento pasado. Esto se conoce como la propiedad de Markov.

La propiedad de Markov es una aproximación, ya que implica una ruptura entre el futuro y el pasado, que no existe en realidad. Sin embargo, esta resulta esencial en el desarrollo de las técnicas de modelación estocástica. En esta situación la idea fundamental consiste en escoger las variables y parámetros del proceso de forma tal que la propiedad de Markov pueda suponerse.

El proceso markoviano cumple con las relaciones:

$$P_2(y_2, t_2) = \int P_{2/1}(y_2, t_2 / y_1, t_1) P_1(y_1, t_1) dy_1 \quad 2.2.2$$

$$P_{3/1}(y_3, t_3 / y_1, t_1) = \int P_{3/2}(y_3, t_3 / y_2, t_2) P_{2/1}(y_2, t_2 / y_1, t_1) dy_2 \quad 2.2.3$$

La ecuación (2.2.3) se conoce como la ecuación de Chapman - Kolmogorov. Considerando un intervalo desde $-\infty$ hasta $+\infty$, la misma tiene como solución:

$$2.2.4 \quad P(y + \Delta y, t + \Delta t / y, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(\Delta t)}} \exp\left(-\frac{(\Delta y)^2}{2\Delta t}\right)$$

Si se cumple que para $t = 0$ $y = 0$, se define entonces un proceso de Markov no estacionario conocido como proceso de Weiner:

$$2.2.5 \quad P(y, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} \exp\left(-\frac{y^2}{2t}\right)$$

El proceso de Weiner es markoviano, gaussiano y no estacionario. En la Figura 2.2.1 se observa el comportamiento de la función de probabilidad de un proceso de Weiner para diferentes valores de tiempo. Este proceso es equivalente a una función de probabilidad normal con valor esperado igual a cero y varianza igual al intervalo de tiempo considerado.

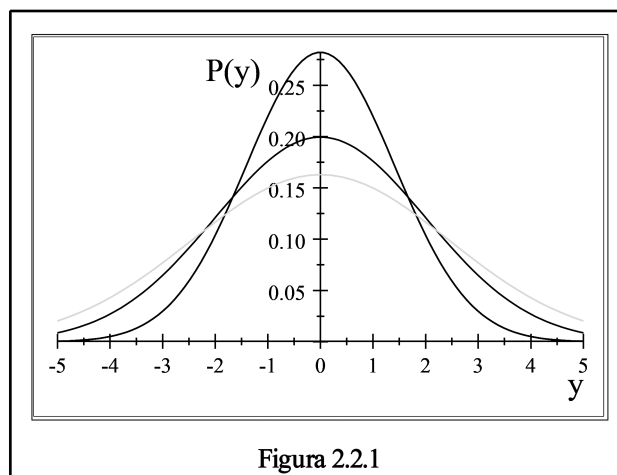


Figura 2.2.1

La ecuación (2.2.5) es la solución de una ecuación diferencial parcial de la forma:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} \quad 2.2.6$$

$$D = \frac{1}{2}$$

Los procesos markovianos no estacionarios cuya probabilidad de transición depende solamente del valor de Δt se denominan procesos homogéneos.

Cuando se tiene un proceso estacionario, gaussiano y markoviano se puede demostrar que su función de probabilidad está dada por:

$$P(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) \quad 2.2.7$$

y se conoce como proceso de Ornstein-Uhlenbeck. La función de autocorrelación de este proceso está dada por:

$$\kappa(\tau) = \kappa(0) \exp(-\gamma\tau) \quad 2.2.8$$

Ejercicio resuelto 2.1

Se tiene un proceso markoviano en el cual para $t=0$ $Y=2$.

¿Cuál es la probabilidad de que Y tome el valor de 4 para $t = 1$?

Solución

A partir de la ecuación (2.2.4) se obtiene:

$$\begin{aligned} P(4,1/2,0) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(4-2)^2}{2}\right) \\ &= 5.3991 \times 10^{-2} \end{aligned}$$

Ejercicio propuesto 2.2

¿Cuál es la probabilidad de que $y = 0.1$ para un proceso de Ornstein-Uhlenbeck?

Respuesta: 0.39

Capítulo **3**

Modelación de las
fluctuaciones internas



3.1. Obtención de la ecuación maestra

La principal dificultad que existe al utilizar la ecuación de Chapman - Kolmogorov está dada por la determinación de las probabilidades de transición asociadas a los cambios en la variable que describe al proceso estocástico. Por esta razón se han desarrollado otros métodos alternativos que permiten tomar en cuenta de forma explícita los fenómenos que tienen lugar en el sistema.

El método de modelación estocástica basado en la Ecuación Maestra es uno de estos métodos, y se utiliza para la descripción de las fluctuaciones internas y la obtención del modelo mesoscópico del mismo.

La Ecuación Maestra es obtenida a partir de la ecuación de Chapman - Kolmogorov, por lo que es válida para procesos markovianos. Expresando la probabilidad de transición de la forma:

$$P(y_2 / y_1) = (1 - a_0 \tau') \delta(y_2 - y_1) + \tau' W(y_2 / y_1) \quad 3.1.1$$

donde τ' es un intervalo de tiempo muy pequeño, a_0 es una constante y $W(y_2/y_1)$ es una función que representa la probabilidad de transición por unidad de tiempo. Sustituyendo la ecuación (3.1.1) en la ecuación de Chapman - Kolmogorov y considerando $\tau' \rightarrow 0$ se obtiene la ecuación maestra:

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \int \{W(y / y') P(y', t) - W(y' / y) P(y, t)\} dy' \quad 3.1.2$$

Con base en que el modelo mesoscópico de un sistema describe el comportamiento determinista del mismo y de las fluctuaciones que tienen origen en el comportamiento de las partículas que lo conforman al nivel microscópico, conviene obtener la forma discreta de la ecuación (3.1.2), la cual se expresa de la forma:

$$\frac{\partial P(n, t)}{\partial t} = \sum_{n'} \{W_{n, n'} P_{n'} - W_{n', n} P_n\} \quad 3.1.3$$

Al respecto el estado del sistema se describe desde el punto de vista microscópico a partir de la evolución del número de partículas totales que existen al nivel microscópico. La elección de estas partículas o entidades microscópicas depende del fenómeno bajo estudio y del nivel de descripción deseado del mismo. Así, estas partículas pueden ser partículas elementales, átomos, moléculas, partículas sólidas de pequeño tamaño, burbujas, gotas de líquido, etc. A su vez, estas partículas pueden ser de diferentes tipos, de forma tal que n es un vector de r componentes y la ecuación maestra ser entonces multivariable. $P(n,t)$ es la probabilidad de tener n partículas al tiempo t , $W_{n,n'}$ y $W_{n',n}$, que representan las probabilidades de transición por unidad de tiempo, están relacionadas con los procesos que tienen lugar al nivel de las partículas elementales.

La idea fundamental aquí es la siguiente: Para un sistema dado formado n_j $j = 1, 2, \dots, r$ partículas microscópicas, se suponen que tienen lugar un conjunto de C procesos a escala microscópica que provocan un cambio k_j en el número de partículas, de forma que la ecuación maestra queda especificada de la forma:

$$3.1.4 \quad \frac{\partial P(n,t)}{\partial t} = \sum_c \{W_{n,n-k}^c P_{n-k} - W_{n+k,n}^c P_n\}$$

La ecuación maestra (3.1.4) es un balance de probabilidad. El primer término de la derecha representa el incremento en el número de partículas debido a la ocurrencia del proceso c ; mientras que el segundo término es la disminución del número debido a la ocurrencia de este proceso.

Utilizando el operador paso que actúa sobre las funciones en variable discreta como:

$$3.1.5 \quad \hat{E}^k f(n) = f(n+k)$$

se deduce que:

$$W_{n,n+k}^c P_{n-k} = \hat{E}^{-k^c} (W_{n+k^c,n}^c P_n) \quad 3.1.6$$

y la Ecuación Maestra puede entonces escribirse en una forma más compacta:

$$\frac{\partial P(n,t)}{\partial t} = \sum_c (\hat{E}^{-k^c} - 1) W_{n+k^c,n}^c P_n \quad 3.1.7$$

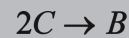
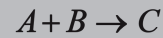
La ecuación maestra involucra a dos escalas de tiempo diferentes. El primero es el tiempo observado macroscópicamente, y aparece de forma explícita en la derivada parcial del lado izquierdo. El segundo es el tiempo en que tienen lugar los procesos a escala microscópica, y aparece de forma implícita en las probabilidades de transición por unidad de tiempo.

El mecanismo por el cual tienen lugar los procesos a escala microscópica debe ser supuesto a partir del conocimiento que se tenga del proceso bajo estudio. Una vez obtenida la ecuación maestra es posible obtener el comportamiento del promedio de todas las partículas, el cual se encuentra relacionado con la variable macroscópica que se observa. Si el comportamiento predicho de esta variable macroscópica se corresponde con el observado, entonces no hay evidencias para plantear que el mecanismo microscópico propuesto no es válido. De lo contrario, hay que suponer otro mecanismo. De esta forma, el método de modelación mesoscópica constituye una de las formas de estudiar el sistema y establecer los fenómenos que en él ocurren.

Sin embargo, una de las debilidades de emplear este método para estudiar fenómenos está en que diferentes mecanismos pueden dar lugar a ecuaciones macroscópicas equivalentes. No hay modo de solucionar esto directamente, ya que el mundo microscópico no puede ser observado de forma directa. Pero sí pueden incluirse otras variables observables del mismo y volver a plantear el mecanismo microscópico, de forma que se pueda precisar mejor el mecanismo involucrado.

Ejercicio resuelto 3.1

Se tiene un sistema en el cual se produce la interacción físico-química entre tres sustancias diferentes y cuyo mecanismo supuesto es el siguiente:



Obtenga la ecuación maestra correspondiente.

Solución:

Para describir el sistema desde el punto de vista microscópico vamos a considerar como entidades las moléculas de cada una de las sustancias presentes, de forma que se tienen tres tipos de partículas diferentes: A , B y C . De modo que el estado del sistema se identifica a partir del número de cada una de estas partículas a través del vector:

$$n = \begin{bmatrix} n_A \\ n_B \\ n_C \end{bmatrix}$$

Existen además 2 procesos a escala microscópica. En el primero $A+B \rightarrow C$, el vector que identifica el cambio en el número de partículas se define a partir de las partículas que interaccionan y las que se producen. En este caso, tiene lugar la disminución de una partícula de A y la disminución de una partícula de B , dando como resultado una partícula C . De forma que el vector de cambio en el número de entidades de este proceso está dado por:

$$r_1 = \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ +1 \end{bmatrix}$$

Para determinar la probabilidad de transición por unidad de tiempo se va a hacer uso de la ecuación:

$$W = k \prod_{j=1}^r \frac{n_j!}{(n_j - a_j)!}$$

donde k es una constante o función que involucra el inverso del tiempo a escala microscópica en el cual tiene lugar el proceso y a_j es la cantidad inicial de partículas involucradas en el proceso.

Se obtiene que para el primer proceso:

$$\begin{aligned} W_1 &= k_1 \frac{n_A!}{(n_A - 1)!} \frac{n_B!}{(n_B - 1)!} \frac{n_C!}{(n_C - 0)!} \\ &= k_1 n_A n_B \end{aligned}$$

Para el segundo proceso se tiene que dos partículas de C interaccionan para dar una partícula B . Por lo tanto, el vector de cambio para el proceso 2 es:

$$r_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ +1 \\ -2 \end{bmatrix}$$

y la probabilidad de transición por unidad de tiempo queda definida de la forma:

$$\begin{aligned} W_2 &= k_2 \frac{n_A!}{(n_A - 0)!} \frac{n_B!}{(n_B - 0)!} \frac{n_C!}{(n_C - 2)!} \\ &= k_2 n_C (n_C - 1) \end{aligned}$$

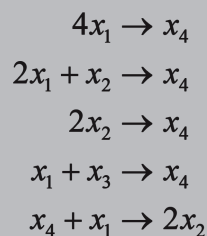
donde k_2 es una constante o función que involucra al inverso del tiempo de duración de este proceso a escala microscópica.

Una vez definidos los vectores de cambio y las probabilidades de transición por unidad de tiempo, se obtiene la ecuación maestra:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(n_A, n_B, n_C; t)}{\partial t} = & \left(\hat{E}_A^{+1} \hat{E}_B^{+1} \hat{E}_C^{-1} - 1 \right) k_1 n_A n_B P(n_A, n_B, n_C; t) \\ & + \left(\hat{E}_A^0 \hat{E}_B^{-1} \hat{E}_C^{+2} - 1 \right) k_2 n_C (n_C - 1) P(n_A, n_B, n_C; t) \end{aligned}$$

Ejercicio propuesto 3.1

Se tiene un sistema formado por las partículas X1, X2, X3 y X4. Se establece que en este sistema tiene lugar el siguiente mecanismo de interacción entre las partículas:



Obtenga la ecuación maestra de este sistema.

Resultado:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P(x; t) = & (E_1^4 E_2^0 E_3^0 E_4^{-1} - 1) k_1 x_1^4 P(x; t) \\ & + (E_1^2 E_2^1 E_3^0 E_4^{-1} - 1) k_2 x_1^2 x_2 P(x; t) \\ & + (E_1^0 E_2^2 E_3^0 E_4^{-1} - 1) k_3 x_2^2 P(x; t) \\ & + (E_1^1 E_2^0 E_3^1 E_4^{-1} - 1) k_4 x_1 x_3 P(x; t) \\ & + (E_1^1 E_2^{-2} E_3^0 E_4^1 - 1) k_5 x_1 x_4 P(x; t) \end{aligned}$$

3.2. Obtención de la ecuación macroscópica

A partir de la Ecuación Maestra es posible obtener la ecuación macroscópica del sistema, la cual se relaciona con la evolución temporal del comportamiento del promedio de todas las partículas.

Este promedio representa el primer momento de la función de distribución de probabilidad $P(n;t)$, de forma tal que:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle n \rangle}{dt} &= \sum_n n \frac{\partial P(n;t)}{\partial t} \\ &= \sum_n \sum_c n (\hat{E}^{-k^c} - 1) W_{n+k^c, n}^c P_n \end{aligned} \quad 3.2.1$$

Tomando en cuenta que el operador paso tiene la siguiente propiedad:

$$\sum_n g(n) \hat{E}^{-k} f(n) = \sum_n f(n) \hat{E}^k g(n) \quad 3.2.2$$

La ecuación (3.2.1) es desarrollada entonces de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle n \rangle}{dt} &= \sum_n \sum_c n (\hat{E}^{-k^c} - 1) W_{n+k^c, n}^c P_n \\ &= \sum_n \sum_c (n \hat{E}^{-k^c} W_{n+k^c, n}^c P_n - n W_{n+k^c, n}^c P_n) \\ &= \sum_n \sum_c (W_{n+k^c, n}^c P_n \hat{E}^{k^c} n - n W_{n+k^c, n}^c P_n) \\ &= \sum_n \sum_c (W_{n+k^c, n}^c P_n (n+k) - n W_{n+k^c, n}^c P_n) \\ &= \sum_n \sum_c (k W_{n+k^c, n}^c P_n) \end{aligned} \quad 3.2.3$$

Como se cumple que

$$\langle W_{n+k^c, n}^c \rangle = \sum_n k W_{n+k^c, n}^c P(n;t) \quad 3.2.4$$

Se obtiene entonces:

$$3.2.5 \quad \frac{d\langle n \rangle}{dt} = \sum_c \langle kW_{n+k^c, n}^c \rangle$$

Desarrollando en series de Taylor alrededor del valor esperado $\langle n \rangle$ el término de la derecha de la ecuación (3.2.5) se obtiene:

$$3.2.6 \quad \langle kW_{n+k^c, n}^c \rangle = kW(\langle n \rangle) + \left[\frac{\partial kW_{n+k^c, n}^c}{\partial n} \right]_{\langle n \rangle} \langle (n - \langle n \rangle) \rangle + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2 kW_{n+k^c, n}^c}{\partial n^2} \right]_{\langle n \rangle} \langle (n - \langle n \rangle)^2 \rangle + \dots$$

En la ecuación (3.2.6) el primer término del lado derecho expresa la influencia del valor esperado, mientras que los restantes términos determinan la influencia de las fluctuaciones. Si solo se toma en cuenta el primer término, se obtiene entonces la ecuación para el comportamiento macroscópico del promedio sin tomar en cuenta la influencia de las fluctuaciones:

$$3.2.7 \quad \frac{d\langle n \rangle}{dt} = \sum_c kW^c(\langle n \rangle)$$

Si ahora se define la variable intensiva observada ϕ en función del promedio $\langle n \rangle$, y se sustituye en la ecuación (3.2.7) la variable intensiva, se obtiene la ecuación determinista del sistema:

$$3.2.8 \quad \frac{d\phi}{dt} = f(\phi)$$

La naturaleza aproximada de esta ecuación determinista es la consecuencia de haber considerado despreciables los términos que involucran a las fluctuaciones. Si ahora se desea tomar en cuenta la influencia de las fluctuaciones para corregir la ecuación macroscópica, se debe entonces obtener el segundo momento de la función de probabilidad, de forma semejante a como se hizo para obtener el primer momento:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle n \rangle}{dt} &= \sum_c k W_c(\langle n \rangle) + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2 k W_c}{\partial n^2} \right]_{\langle n \rangle} (\langle n^2 \rangle - 2\langle n \rangle^2) \\ \frac{d\langle n^2 \rangle}{dt} &= \sum_c (\langle 2nk W_{n+k^c, n}^c \rangle + \langle k^2 W_{n+k^c, n}^c \rangle) \end{aligned} \quad 3.2.9$$

Ahora bien, tomando la ecuación (3.2.6), se observa que el segundo término de la derecha representa el valor esperado de las fluctuaciones, el cual es igual a cero, por lo que el mismo puede ser despreciado. En cambio, el tercer término, que involucra al segundo momento, se relaciona con la magnitud de las fluctuaciones (este término representa la varianza), de forma tal que la ecuación macroscópica corregida para tomar en cuenta las fluctuaciones queda:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle n \rangle}{dt} &= \sum_c k_c W_c(n) + \frac{1}{2} \left[\frac{d^2}{dn^2} \sum_c k_c W_c(n) \right] \sigma \\ \sigma &= (\langle n^2 \rangle - 2\langle n \rangle^2) \end{aligned} \quad 3.2.10$$

La ecuación (3.2.10) constituye el modelo mesoscópico del sistema, el cual está formado por un sistema de dos ecuaciones diferenciales temporales, una para el primer momento y la otra para el segundo momento.

El criterio que se emplea para considerar que las fluctuaciones internas son despreciables es:

$$3.2.11 \quad \left| \frac{\left\langle \sum_c k^2 W_{n+k^c, n}^c \right\rangle \left\langle \frac{\partial^2 \sum_c k W_{n+k^c, n}^c}{\partial n^2} \right\rangle}{4 \left\langle \frac{\partial \sum_c k W_{n+k^c, n}^c}{\partial n} \right\rangle} \right| \leq \left| \left\langle \frac{\partial \sum_c k W_{n+k^c, n}^c}{\partial n} \right\rangle \right|$$

Ejercicio resuelto 3.2

Se tiene un proceso en el cual se produce la ruptura de una partícula en dos partículas más pequeñas. Como variable intensiva se considera la cantidad de partículas p por unidad de volumen del sistema. Se conoce que la concentración inicial es de 40 000 p/L, y de que el tiempo en que demora en alcanzarse una concentración promedio igual a la mitad del valor inicial es de 10 minutos.

Determine la probabilidad de que la concentración sea menor que un 30% de la concentración inicial de partículas para un tiempo igual a 12 minutos considerando un volumen de 1 L y 0.001 L, respectivamente.

Solución:

El proceso que tiene lugar a escala microscópica se describe de la forma:



donde X es la partícula cuyo comportamiento se desea modelar y γ representa a una de las partículas más pequeñas en las cuales se descompone X . Como solo interesa el comportamiento de un tipo de partícula, la ecuación maestra es unidimensional. El vector de cambio queda definido como:

$$k = -1$$

y la probabilidad de transición por unidad de tiempo se describe como:

$$W = g \frac{X!}{(X-1)!} = gX$$

donde g es un parámetro del sistema que se relaciona con la constante de velocidad de desintegración de X .

La ecuación maestra queda entonces:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = (\hat{E}^{+1} - 1)gXP$$

para obtener el comportamiento macroscópico se multiplica por X y se suma para todas las X , obteniéndose:

$$\begin{aligned} \sum_X X \frac{\partial P}{\partial t} &= \sum_X X (\hat{E}^{+1} - 1)gXP \\ &= \sum_X (X\hat{E}^{+1}gXP - XgXP) \\ &= \sum_X (gXP\hat{E}^{-1}X - XgXP) \\ &= \sum_X (gXP(X-1) - XgXP) \\ &= \sum_X -gXP \\ \frac{d\langle X \rangle}{dt} &= -g\langle X \rangle \end{aligned}$$

Considerando que la concentración se relaciona con el promedio de las partículas de acuerdo a la relación:

$$C = \frac{\langle X \rangle}{V}$$

se obtiene la ecuación determinista del sistema:

$$\frac{dC}{dt} = -gC$$

considerando C_0 el número inicial de partículas presente en el sistema, la solución de esta ecuación diferencial es:

$$C = C_0 \exp(-gt)$$

Para obtener el modelo mesoscópico se necesita determinar el segundo momento. Para ello se plantea:

$$\begin{aligned}
 \sum_X X^2 \frac{\partial P}{\partial t} &= \sum_X X^2 (\hat{E}^{+1} - 1) gXP \\
 &= \sum_X (X^2 \hat{E}^{+1} gXP - X^2 gXP) \\
 &= \sum_X (gXP \hat{E}^{-1} X^2 - X^2 gXP) \\
 &= \sum_X (gXP(X-1)^2 - X^2 gXP) \\
 &= \sum_X (-2gX^2P + gXP) \\
 \frac{d\langle X^2 \rangle}{dt} &= -2g\langle X^2 \rangle + g\langle X \rangle
 \end{aligned}$$

El modelo macroscópico, tomando en cuenta la corrección por las fluctuaciones:

$$\frac{d\langle X \rangle}{dt} = -g\langle X \rangle + \frac{d^2(-gX)}{dX^2} \langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle$$

Como $\frac{d^2(-gX)}{dX^2} = 0$, las fluctuaciones no influyen en el comportamiento promedio, es decir, las mismas no generan cambios en el valor determinista. Sin embargo, esto no significa todavía que las fluctuaciones se puedan despreciar. Las ecuaciones para el primero y segundo momentos quedan entonces de la forma:

$$\begin{aligned}
 \frac{d\langle X \rangle}{dt} &= -g\langle X \rangle \\
 \frac{d\langle X^2 \rangle}{dt} &= -2g\langle X^2 \rangle + g\langle X \rangle
 \end{aligned}$$

Sustituyendo ahora por la variable intensiva concentración se obtiene:

$$\frac{d\langle C \rangle}{dt} = -g\langle C \rangle$$

$$\frac{d\langle C^2 \rangle}{dt} = -2g\langle C^2 \rangle + \frac{g}{V}\langle C \rangle$$

Para resolver este sistema de ecuaciones se considera que la varianza es igual a cero en el instante inicial, obteniéndose:

$$\langle C \rangle = C_0 \exp(-gt)$$

$$\langle C^2 \rangle = \frac{C_0}{V} (e^{-gt} + e^{-2gt}(C_0 V - 1))$$

$$\sigma^2 = \frac{C_0}{V} e^{-gt} - \frac{C_0}{V} e^{-2gt}$$

Se conoce que la concentración inicial de partículas es de 40 000 p/L y que las observaciones indican que el tiempo en que se alcanza como promedio la mitad de la concentración es de 10 minutos. Por lo tanto, se tiene para el valor esperado:

$$\frac{C_0}{2} = C_0 \exp(-gt)$$

$$0.5 = \exp(-g10)$$

de donde se determina el valor de la constante g :

$$g = 6.9315 \times 10^{-2}$$

La ecuación para el valor esperado queda entonces:

$$\langle C \rangle = 40000 \exp(-6.9315 \times 10^{-2} t)$$

La ecuación para la varianza depende del volumen, y se obtiene:

$$V = 10 \rightarrow \sigma^2 = \frac{40000}{1} e^{-6.9315 \times 10^{-2} t} - \frac{40000}{1} e^{-2 * 6.9315 \times 10^{-2} t}$$

$$V = 5 \rightarrow \sigma^2 = \frac{40000}{0.001} e^{-6.9315 \times 10^{-2} t} - \frac{40000}{0.001} e^{-2 * 6.9315 \times 10^{-2} t}$$

En la Figura 3.2.1 se muestra el comportamiento temporal del valor esperado, mientras que en la Figura 3.2.2 el de de la varianza para el volumen de 1 L, en tanto que en la Figura 3.2.3 se expone el comportamiento de la varianza para un volumen

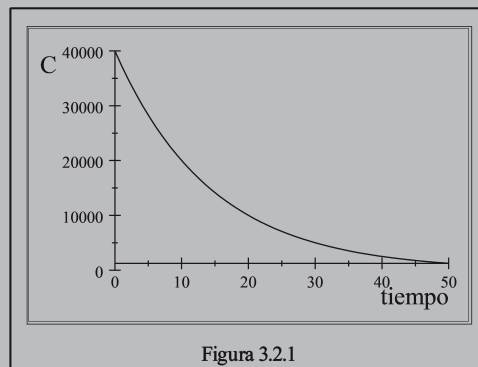


Figura 3.2.1

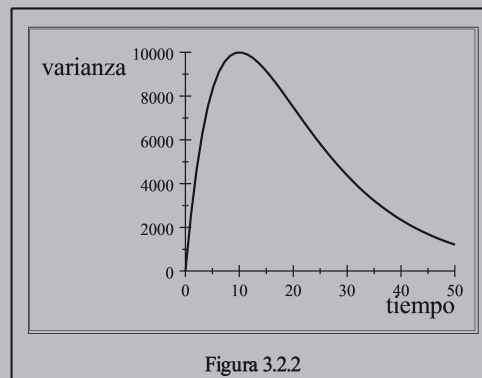
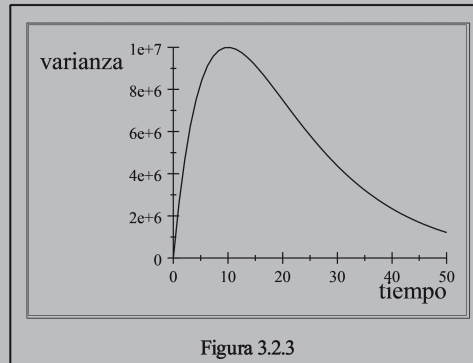


Figura 3.2.2



Ahora se va a determinar la probabilidad de que al cabo de 12 minutos la concentración sea menor que un 30% de su valor inicial, si se considera que la función de probabilidad es normal. Para este valor de tiempo, el valor esperado y la varianza son:

$$\langle C \rangle = 40000 \exp(-6.9315 \times 10^{-2} * 12)$$

$$= 17411.$$

$$V = 10 \rightarrow \sigma^2 = \frac{40000}{1} e^{-6.9315 \times 10^{-2} * 12} - \frac{40000}{1} e^{-2 * 6.9315 \times 10^{-2} * 12}$$

$$= 9832.4$$

$$V = 5 \rightarrow \sigma^2 = \frac{40000}{0.001} e^{-6.9315 \times 10^{-2} * 12} - \frac{40000}{0.001} e^{-2 * 6.9315 \times 10^{-2} * 12}$$

$$= 9.8324 \times 10^6$$

El 30% de la concentración inicial es:

$$c = 0.30 * 40000$$

$$= 12000$$

Para un volumen de 1 L la probabilidad de que la concentración de partículas sea menor que un 30% del valor inicial es:

$$P(C < 12000) = \frac{1}{\sqrt{2 * 3.1416 * 9832.4}} \int_0^{12000} e^{-\frac{(u-17411)^2}{2 * 1966.5}} du$$

$$\cong 0$$

mientras que para el volumen de 0.001 L:

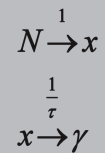
$$P(C < 12000) = \frac{1}{\sqrt{2 * 3.1416 * 9.8324 \times 10^6}} \int_0^{12000} e^{-\frac{(u-17411)^2}{2 * 9.8324 \times 10^6}} du$$

$$= 4.2207 \times 10^{-2}$$

Nótese como para un volumen de un litro, la probabilidad de que la concentración sea menor que 12 000, lo cual implica una diferencia de 5411 o más por debajo del valor esperado, es prácticamente igual a cero, mientras que para un volumen 1000 veces menor existe una probabilidad de un 4% de que esto se cumpla. Esto se debe a que a medida que disminuye el tamaño del sistema las fluctuaciones internas se incrementan y por lo tanto hay un aumento en la posibilidad de desviarse de forma significativa del valor esperado.

Ejercicio propuesto 3.2

Se tiene un sistema en el cual se supone que tienen lugar los siguientes procesos a escala microscópica:



donde N es el número total de partículas que entran en el sistema de volumen V , el cual se considera una variable determinista y constante; x representa la cantidad de partículas presentes en este volumen, τ es el tiempo de residencia de la partícula en el sistema y γ significa el exterior del sistema. La variable macroscópica intensiva es la concentración de partículas.

Obtenga el modelo mesoscópico que describe el comportamiento de la concentración de partículas en el interior del sistema.

Resultado:

$$\begin{aligned} \frac{dc}{dt} &= \frac{N}{V} - \frac{1}{\tau}c \\ \frac{d\sigma}{dt} &= -\frac{2}{\tau}\sigma + \frac{1}{V} \left(\frac{N}{V} + \frac{1}{\tau}c \right) \\ c &= \frac{\langle x \rangle}{V} \end{aligned}$$

3.2. Solución de la ecuación maestra

La solución de la ecuación maestra significa encontrar la función de probabilidad o el comportamiento de los momentos de la misma. En realidad, el método de solución que se expone en el ejercicio resuelto 3.2, consistente en multiplicar por n^v y sumar para todas las n para determinar el comportamiento del momento v solo es válido cuando las probabilidades de transición son lineales, con respecto a n . Se ha demostrado que cuando las probabilidades de transición por unidad de tiempo son lineales la probabilidad es normal o gaussiana, por lo que la misma queda completamente determinada a partir del primero y segundo momento.

Sin embargo, este método no puede aplicarse cuando las probabilidades de transición por unidad de tiempo no son lineales. En este sentido, existen diferentes métodos que pueden ser aplicados, pero todos ellos solo permiten obtener una solución aproximada, dada la imposibilidad de encontrar una solución analítica de forma explícita.

El método de desarrollo de la Ecuación Maestra con aproximación lineal al ruido, desarrollado por van Kampen, permite obtener la solución exacta de la probabilidad cuando el proceso se encuentra en estado estacionario (ya que en estado estacionario las fluctuaciones tienen una distribución de probabilidad normal) y/o cuando las probabilidades de transición son lineales (ya que se ha demostrado matemáticamente que la solución es una probabilidad normal). En caso de que el proceso sea no estacionario y que las probabilidades de transición por unidad de tiempo sean no lineales, la solución que se obtiene es aproximada.

Este método se basa en considerar que la magnitud de las fluctuaciones internas depende de un parámetro Ω relacionado con el tamaño del sistema observado, de forma tal que las fluctuaciones internas son despreciables cuando el tamaño del sistema es considerablemente ma-

yor que el de las partículas microscópicas que lo componen. Se basa en efectuar un desarrollo en series de potencias de Ω y en determinar las diferentes ecuaciones que se obtienen cuando se saca como factor común Ω^n . Debido a que solo se toman las ecuaciones que describen el comportamiento del primero y segundo momento, el método se denomina aproximación lineal al ruido.

La aplicación del método de desarrollo de forma exacta resulta ser complicado desde el punto de vista matemático. Por esta razón se ha desarrollado la siguiente metodología, que no es más que el mecanismo, para determinar la solución de la Ecuación Maestra de una forma más fácil.

1. Dada una Ecuación Maestra de la forma:

$$3.3.1 \quad \frac{\partial P(N,t)}{\partial t} = (\hat{E}_1^{-k_1} \dots \hat{E}_r^{-k_r} - 1) \mathcal{W}(N) P(N,t)$$

donde, para simplificar, se ha tomado en cuenta un solo proceso microscópico. En la ecuación (3.3.1) N es el vector que representa a cada una de las r tipos de partículas microscópicas presentes en el sistema:

$$3.3.2 \quad N = \begin{bmatrix} n_1 \\ . \\ n_r \end{bmatrix}$$

El vector de cambio se determina como:

$$3.3.3 \quad K = \begin{bmatrix} k_1 \\ . \\ k_r \end{bmatrix}$$

2. El valor esperado $\langle N \rangle$ se determina como:

$$\frac{d\langle N \rangle}{dt} = KW(\langle N \rangle) \quad 3.3.4$$

$$\begin{bmatrix} \frac{d\langle n_1 \rangle}{dt} \\ \cdot \\ \frac{d\langle n_r \rangle}{dt} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_1 W(\langle N \rangle) \\ \cdot \\ k_r W(\langle N \rangle) \end{bmatrix}$$

3. El segundo momento, relacionado con la varianza es:

$$\langle N^2 \rangle = \left\langle \begin{bmatrix} n_1 \\ \cdot \\ n_r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n_1 & \cdot & n_r \end{bmatrix} \right\rangle = \begin{bmatrix} \langle n_1^2 \rangle & \cdot & \langle n_1 n_r \rangle \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \langle n_1 n_r \rangle & \cdot & \langle n_r^2 \rangle \end{bmatrix} \quad 3.3.5$$

4. Se determina la matriz A , la cual está definida por:

$$A(\langle N \rangle) = \frac{d(KW(\langle N \rangle))}{dN} \quad 3.3.6$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{d}{dn_1} \\ \cdot \\ \frac{d}{dn_r} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} k_1 W(\langle N \rangle) & \cdot & k_r W(\langle N \rangle) \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{dk_1 W(\langle N \rangle)}{dn_1} & \cdot & \frac{dk_r W(\langle N \rangle)}{dn_1} \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \frac{dk_1 W(\langle N \rangle)}{dn_r} & \cdot & \frac{dk_r W(\langle N \rangle)}{dn_r} \end{bmatrix}$$

5. Se determina la matriz B de la forma:

$$\begin{aligned}
 3.3.7 \quad B(\langle N \rangle) &= K^2 W(\langle N \rangle) \\
 &= \begin{bmatrix} k_1 \\ \cdot \\ k_r \end{bmatrix} [k_1 \quad \cdot \quad k_r] W(\langle N \rangle) \\
 &= \begin{bmatrix} k_1^2 W(\langle N \rangle) & \cdot & k_1 k_r W(\langle N \rangle) \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ k_1 k_r W(\langle N \rangle) & \cdot & k_r^2 W(\langle N \rangle) \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

6. La ecuación para la varianza o segundo momento de las fluctuaciones queda determinado como:

$$\begin{aligned}
 3.3.8 \quad \frac{d\langle N^2 \rangle}{dt} &= A(\langle N \rangle) \langle N^2 \rangle + \langle N^2 \rangle [A(\langle N \rangle)]^T + B(\langle N \rangle) \\
 &= \begin{bmatrix} \frac{dk_1 W(\langle N \rangle)}{dn_1} & \cdot & \frac{dk_r W(\langle N \rangle)}{dn_1} \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \frac{dk_1 W(\langle N \rangle)}{dn_r} & \cdot & \frac{dk_r W(\langle N \rangle)}{dn_r} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \langle n_1^2 \rangle & \cdot & \langle n_1 n_r \rangle \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \langle n_1 n_r \rangle & \cdot & \langle n_r^2 \rangle \end{bmatrix} \\
 &+ \begin{bmatrix} \langle n_1^2 \rangle & \cdot & \langle n_1 n_r \rangle \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \langle n_1 n_r \rangle & \cdot & \langle n_r^2 \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{dk_1 W(\langle N \rangle)}{dn_1} & \cdot & \frac{dk_r W(\langle N \rangle)}{dn_1} \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \frac{dk_1 W(\langle N \rangle)}{dn_r} & \cdot & \frac{dk_r W(\langle N \rangle)}{dn_r} \end{bmatrix}^T \\
 &+ \begin{bmatrix} k_1^2 W(\langle N \rangle) & \cdot & k_1 k_r W(\langle N \rangle) \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ k_1 k_r W(\langle N \rangle) & \cdot & k_r^2 W(\langle N \rangle) \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

7. Para precisar el modelo mesoscópico del sistema, se establece la relación entre el número de entidades N y el vector x correspondiente a las variables macroscópicas intensivas. Así se obtiene para que el valor esperado es:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\langle N^2 \rangle}{[f(\Omega)]^2} \quad 3.3.9$$

mientras que la varianza:

$$\langle x \rangle = \frac{\langle N \rangle}{f(\Omega)} \quad 3.3.10$$

donde Ω es un parámetro que representa el tamaño del sistema.

Sustituyendo adecuadamente las ecuaciones (3.3.9) y (3.3.10) en las ecuaciones (3.3.4) y (3.3.8) se obtiene el modelo mesoscópico del sistema:

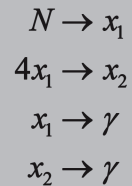
$$\frac{d\langle x \rangle f(\Omega)}{dt} = KW(\langle x \rangle f(\Omega)) \quad 3.3.11$$

$$\begin{aligned} \frac{d\langle x^2 \rangle [f(\Omega)]^2}{dt} = & A(\langle x \rangle f(\Omega)) \langle x^2 \rangle [f(\Omega)]^2 + \langle x^2 \rangle [f(\Omega)]^2 [A(\langle x \rangle f(\Omega))]^T \\ & + B(\langle x \rangle f(\Omega)) \end{aligned} \quad 3.3.12$$

La solución estacionaria es alcanzada haciendo igual a cero la derivada con respecto al tiempo en el lado derecho de las ecuaciones (3.3.11) y (3.3.12).

Ejercicio resuelto 3.3

Se tiene un sistema en el que supone ocurren los siguientes procesos a escala microscópica:



donde N es una constante que representa la cantidad de partículas de la especie 1 que entran y γ representa el exterior del sistema. Considere como variables macroscópicas intensivas:

$$\begin{aligned} C_0 &= \frac{N\rho_1v_1}{F} \\ C_1 &= \frac{x_1\rho_1v_1}{V} \\ C_2 &= \frac{x_2\rho_2v_2}{V} \end{aligned}$$

donde ρ representa la densidad de la partícula, v el volumen de la partícula, C son las concentraciones definidas como masa por unidad de volumen y V es el volumen del sistema. Obtenga el modelo mesoscópico correspondiente al comportamiento de estado estacionario de este sistema.

Solución:

Como en el sistema existen dos partículas diferentes, el vector que define las variables microscópicas que caracterizan al sistema es:

$$X = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

El primer paso consiste en la obtención de la ecuación maestra. El primer proceso está relacionado con la entrada de las partículas del tipo 1 en el sistema, de forma que:

$$W_1 = N$$

donde el vector de cambio en el número de entidades asociado a este proceso está definido por:

$$K_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

El segundo proceso corresponde a la interacción de 4 partículas del tipo 1 para dar lugar a 1 partícula del tipo 2. De este modo:

$$W_2 = g' \frac{x_1!}{(x_1 - 4)!} = g' x_1 (x_1 - 1)(x_1 - 2)(x_1 - 3) \cong g' x_1^4$$

La aproximación se establece porque cuando el número de partículas es muy elevado, es posible considerar solamente el término correspondiente al mayor exponente.

El vector de cambio correspondiente a este proceso es:

$$K_2 = \begin{bmatrix} -4 \\ 1 \end{bmatrix}$$

El proceso 3 se relaciona con la salida de las partículas del tipo 1 del sistema. Se toma en cuenta que la probabilidad de transición de que este proceso tenga lugar es proporcional al inverso del tiempo de residencia τ de las partículas, de forma que:

$$W_3 = \frac{F}{V} \frac{x_1!}{(x_1 - 1)!} = \frac{F}{V} x_1$$

El vector de cambio de este proceso está definido como:

$$K_3 = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

El proceso 4 se encuentra relacionado con la salida de las partículas de tipo 2 y está definido como:

$$W_4 = \frac{F}{V} \frac{x_2!}{(x_2-1)!} = \frac{F}{V} x_2$$

$$K_4 = \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix}$$

La ecuación maestra queda entonces escrita de la forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial t} &= (E_1^{-1} E_2^0 - 1)NP + (E_1^{+4} E_2^{-1} - 1)g'x_1^4 P \\ &= (E_1^{+1} E_2^0 - 1)\frac{F}{V} x_1 P + (E_1^0 E_2^{+1} - 1)\frac{F}{V} x_2 P \end{aligned}$$

Para obtener la ecuación correspondiente al valor esperado del número de partículas se tiene:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \frac{d\langle x_1 \rangle}{dt} \\ \frac{d\langle x_2 \rangle}{dt} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} N + \begin{bmatrix} -4 \\ 1 \end{bmatrix} g'x_1^4 \\ &+ \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix} \frac{F}{V} x_1 + \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix} \frac{F}{V} x_2 \\ &= \begin{bmatrix} N - 4\langle x_1 \rangle^4 g' - \langle x_1 \rangle \frac{F}{V} \\ \langle x_1 \rangle^4 g' - \langle x_2 \rangle \frac{F}{V} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

sustituyendo en esta ecuación por la relación entre el valor esperado del número de partículas y el valor esperado o determinista de las variables intensivas:

$$\begin{bmatrix} \frac{dC_1}{dt} \\ \frac{dC_2}{dt} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{F}{V} C_0 - R_1 C_1^4 - \frac{F}{V} C_1 \\ R_2 C_1^4 - \frac{F}{V} C_2 \end{bmatrix}$$

donde las constantes de velocidad observadas asociadas con el proceso de conversión de las partículas de tipo 1 a partículas de tipo 2 se relacionan con la constante microscópica g' de acuerdo con:

$$R_1 = \frac{4V^3 g'}{\rho_1^3 v_1^3}$$

$$R_2 = \frac{\rho_2 v_2 V^3 g'}{\rho_1^4 v_1^4}$$

La matriz correspondiente a la varianza está dada por:

$$\text{var} = \begin{matrix} x_1 & x_1 & x_2 \\ x_2 & & \end{matrix}$$

$$= \begin{bmatrix} x_1^2 & x_1 x_2 \\ x_1 x_2 & x_2^2 \end{bmatrix}$$

la matriz A se define:

$$A = \begin{bmatrix} \frac{d}{dx_1} \\ \frac{d}{dx_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} N - 4x_1^4 g - x_1 \frac{F}{V} & x_1^4 g - x_2 \frac{F}{V} \\ \frac{d(N - 4x_1^4 g - x_1 \frac{F}{V})}{dx_1} & \frac{d(x_1^4 g - x_2 \frac{F}{V})}{dx_1} \\ \frac{d(N - 4x_1^4 g - x_1 \frac{F}{V})}{dx_2} & \frac{d(x_1^4 g - x_2 \frac{F}{V})}{dx_2} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} -\frac{16x_1^3 g V + F}{V} & 4x_1^3 g \\ 0 & -\frac{F}{V} \end{bmatrix}$$

y su transpuesta:

$$A^T = \begin{bmatrix} -\frac{16x_1^3 g V + F}{V} & 0 \\ 4x_1^3 g & -\frac{F}{V} \end{bmatrix}$$

La matriz B se define:

$$\begin{aligned}
 B &= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} [1 \quad 0] N + \begin{bmatrix} -4 \\ 1 \end{bmatrix} [-4 \quad 1] g' x_1^4 \\
 &+ \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix} [-1 \quad 0] \frac{F}{V} x_1 + \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix} [0 \quad -1] \frac{F}{V} x_2 \\
 &= \begin{bmatrix} N + 16x_1^4 g + x_1 \frac{F}{V} & -4x_1^4 g \\ -4x_1^4 g & x_1^4 g + x_2 \frac{F}{V} \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

Por tanto, la ecuación para las varianzas y covarianzas toma la forma:

$$\begin{aligned}
 \frac{d\langle x_1^2 \rangle}{dt} &= -2 \frac{16\langle x_1 \rangle^3 g V + F}{V} \langle x_1^2 \rangle + 8x_1^3 g \langle x_1 x_2 \rangle + N + 16\langle x_1 \rangle^4 g + \langle x_1 \rangle \frac{F}{V} \\
 \frac{d\langle x_2^2 \rangle}{dt} &= -2 \frac{F}{V} \langle x_2^2 \rangle + \langle x_1 \rangle^4 g + \langle x_2 \rangle \frac{F}{V} \\
 \frac{d\langle x_1 x_2 \rangle}{dt} &= -\frac{16\langle x_1 \rangle^3 g V + F}{V} \langle x_1 x_2 \rangle + 4\langle x_1 \rangle^3 g \langle x_2^2 \rangle - \frac{F}{V} \langle x_1 x_2 \rangle - 4\langle x_1 \rangle^4 g
 \end{aligned}$$

Ahora se sustituye la ecuación para la varianza en función de las variables intensivas y de las constantes de velocidad macroscópicas asociadas con el proceso mediante el cual 4 partículas del tipo 1 dan origen a 1 partícula del tipo 2.

$$\begin{aligned}\frac{d\langle C_1^2 \rangle}{dt} &= -\frac{2}{V} \left(4\langle C_1 \rangle^3 VR_1 + F \right) \langle C_1^2 \rangle + \frac{R_1 \langle C_1 \rangle^3 R_1}{2R_2} \langle C_1 C_2 \rangle \\ &\quad + \frac{\rho_1 v_1}{V} \left(C_0 \frac{F}{V} + 4\langle C_1 \rangle^4 R_1 + C_1 \frac{F}{V} \right) \\ \frac{d\langle C_2^2 \rangle}{dt} &= -2\frac{F}{V} \langle C_2^2 \rangle + \frac{\rho_2 v_2}{V} \left(R_2 \langle C_1 \rangle^4 + \frac{F}{V} \langle C_2 \rangle \right) \\ \frac{d\langle C_1 C_2 \rangle}{dt} &= -\frac{1}{V} \left(4\langle C_1 \rangle^3 VR_1 + F \right) \langle C_1 C_2 \rangle + \frac{R_1}{4R_2} \langle C_1 \rangle^3 R_1 \langle C_2^2 \rangle \\ &\quad - \frac{1}{V} F \langle C_1 C_2 \rangle - \frac{\rho_2 v_2}{V} \langle C_1 \rangle^4 R_1\end{aligned}$$

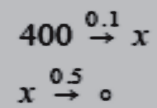
En el estado estacionario las derivadas temporales se hacen igual a cero, de forma que el modelo de estado estacionario está definido por:

$$\begin{aligned}\frac{F}{V} \langle C_0 \rangle &= R_1 \langle C_1 \rangle^4 + \frac{F}{V} \langle C_1 \rangle \\ R_2 \langle C_1 \rangle^4 &= \frac{F}{V} C_2 \\ \frac{2}{V} \left(4\langle C_1 \rangle^3 VR_1 + F \right) \langle C_1^2 \rangle - \frac{R_1 \langle C_1 \rangle^3 R_1}{2R_2} \langle C_1 C_2 \rangle &= \frac{\rho_1 v_1}{V} \left(C_0 \frac{F}{V} + 4\langle C_1 \rangle^4 R_1 + C_1 \frac{F}{V} \right) \\ -\frac{1}{V} \left(4\langle C_1 \rangle^3 VR_1 + F \right) \langle C_1 C_2 \rangle + \frac{R_1}{4R_2} \langle C_1 \rangle^3 R_1 \langle C_2^2 \rangle - \frac{1}{V} F \langle C_1 C_2 \rangle &= \frac{\rho_2 v_2}{V} \langle C_1 \rangle^4 R_1 \\ -2\frac{F}{V} \langle C_2^2 \rangle &= \frac{\rho_2 v_2}{V} \left(R_2 \langle C_1 \rangle^4 + \frac{F}{V} \langle C_2 \rangle \right)\end{aligned}$$

El término de la derecha de las ecuaciones correspondientes a la varianza es proporcional a la relación entre el volumen de las partículas y el volumen del sistema, por lo que las fluctuaciones serán apreciables cuando esta relación tenga un valor apreciable.

Ejercicio propuesto 3.3

Obtenga el comportamiento mesoscópico en estado estacionario para un sistema de volumen $V = 10$ en el cual los procesos microscópicos que ocurren son:



Respuesta: Función de probabilidad normal con valor esperado $x/V = 8$ y varianza de 0.8

Capítulo 4

Ecuación de Fokker-Planck



4.1. Obtención de la Ecuación de Fokker-Plank

La *ecuación de Fokker-Plank*, al igual que la Ecuación Maestra, es obtenida a partir de la ecuación de Chapman-Kolmogorov, pero tomando en cuenta que las variables que describen al sistema bajo estudio son continuas en lugar de discretas, por lo que se puede estimar como una aproximación de la Ecuación Maestra cuando el número de partículas se puede considerar como una variable continua.

La ecuación de Fokker-Plank para sistemas que se describen en función de una sola variable tiene la forma:

$$\frac{\partial P(y;t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial y} \{A(y)P(y;t)\} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \{B(y)P(y;t)\} \quad 4.1.1$$

mientras que para el caso multivariable esta ecuación es:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(y_1, \dots, y_r; t)}{\partial t} = & -\sum_{i=1}^r \frac{\partial}{\partial y_i} \{A_i(y_1, \dots, y_r; t)P(y_1, \dots, y_r; t)\} \\ & + \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^r \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_j} \{B(y_1, \dots, y_r; t)P(y_1, \dots, y_r; t)\} \end{aligned} \quad 4.1.2$$

La ecuación de Fokker-Plank tiene algunas ventajas en comparación con la ecuación maestra. En primer lugar, es una ecuación diferencial parcial que es más fácil de resolver desde el punto de vista matemático que una ecuación diferencial en diferencias

En segundo lugar, no se requiere conocer o establecer el comportamiento de las probabilidades de transición por unidad de tiempo, sino de las funciones $A(y)$ y $B(y)$, las que pueden ser obtenidas experimentalmente. En este sentido, $A(y)$ se encuentra relacionada con el comportamiento promedio de la variable:

$$4.1.3 \quad \frac{d\langle y \rangle}{dt} = A\langle y \rangle$$

mientras que $B(y)$ se corresponde con el comportamiento observado de las fluctuaciones:

$$4.1.4 \quad \frac{d\langle y^2 \rangle}{dt} = B\langle y \rangle$$

Cuando se analiza el caso de las fluctuaciones internas, y representa al número total de partículas presentes en el sistema, y su comportamiento puede ser estimado a partir del modelo determinista del sistema. En este caso, supóngase que $A(y)$ puede ser expresada como:

$$4.1.5 \quad A(y) = \sum A_i(y)$$

entonces $B(y)$ puede ser estimado mediante la ecuación:

$$4.1.6 \quad B(y) = \sum |A_i(y)|$$

donde $|A_i(y)|$ significa el valor absoluto de $A_i(y)$.

La solución de la ecuación de Fokker-Plank para el estado estacionario es:

$$P_s = \frac{C}{B(y_s)} \exp\left(2 \int_0^{y_s} \frac{A(y')}{B(y')} dy'\right) \quad 4.1.7$$

donde C es una constante de normalización, la cual se determina considerando que la función de probabilidad acumulativa para todos los valores posibles de la variable es igual a la unidad.

Se puede demostrar, además, que el comportamiento del valor esperado y la varianza de la probabilidad P se determinan como:

$$\frac{d\langle y \rangle}{dt} = \langle A(y) \rangle \quad 4.1.8$$

$$\frac{d\sigma^2}{dt} = 2\langle (y - \langle y \rangle) A(y) \rangle + \langle B(y) \rangle \quad 4.1.9$$

En el caso de la solución de estado estacionario, se tiene que:

$$\begin{aligned} A(y_s) &= 0 \\ \sigma^2 &= -\frac{1}{2} B(y_s) \left(\left[\frac{dA(y)}{dy} \right]_{y_s} \right)^{-1} \\ \kappa(t) &= \sigma^2 \exp\left(-\frac{t}{t_0}\right) \\ -\frac{1}{t_0} &= \left[\frac{dA(y)}{dy} \right]_{y_s} \end{aligned} \quad 4.1.10$$

donde $\kappa(t)$ es la función de autocorrelación y t_0 es el tiempo de autocorrelación temporal.

Ejercicio resuelto 4.1

Se tiene un reactor de mezcla completa donde se produce una reacción autocatalítica de segundo orden y cuya ecuación determinista, obtenida a partir de un balance de materia, está dada por:

$$\frac{dC}{dt} = kC^2 - \frac{F}{V}C + \frac{F}{V}C_0$$

donde C_0 es la concentración de entrada, F el flujo de entrada, V el volumen del reactor (constante), k la constante de velocidad de reacción y C la concentración de salida. C_0 y F se toman como constantes.

Considere la siguiente relación entre las variables intensivas macroscópicas y el número de partículas (variable microscópica):

$$\begin{aligned} X &= CV \\ X_0 &= FC_0 \end{aligned}$$

Determine el modelo mesoscópico de estado estacionario y la función de probabilidad correspondiente a partir de la ecuación de Fokker-Plank.

Solución:

A partir de la ecuación determinista del sistema y tomando en cuenta la relación entre las variables intensivas y las extensivas se determina:

$$\frac{dX}{dt} = \frac{k}{V}X^2 - F\frac{X}{V} + X_0$$

El coeficiente A de la ecuación de Fokker-Plank está dado por:

$$A(X) = \frac{k}{V} X^2 - F \frac{X}{V} + X_0$$

mientras que el coeficiente B es:

$$B(X) = \frac{k}{V} X^2 + F \frac{X}{V} + X_0$$

De aquí que la ecuación de Fokker-Plank correspondiente es:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(X;t)}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial X} \left\{ \left(\frac{k}{V} X^2 - F \frac{X}{V} + X_0 \right) P(X;t) \right\} \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial X^2} \left\{ \left(\frac{k}{V} X^2 + F \frac{X}{V} + X_0 \right) P(X;t) \right\} \end{aligned}$$

El comportamiento de la probabilidad en estado estacionario de este proceso es:

$$\begin{aligned} P_s &= \frac{C}{B(y_s)} \exp(F) \\ F &= 2 \int_0^{X_s} \left(\frac{\frac{k}{V} X^2 - F \frac{X}{V} + X_0}{\frac{k}{V} X^2 + F \frac{X}{V} + X_0} \right) dX \\ &= 2X_s - \frac{2}{k} F \ln \left((kX_s^2 + FX_s + X_0V) X_0V \right) \\ &\quad + 2F^2 \left(\arctan \frac{2kX_s + F}{\sqrt{(4kX_0V - F^2)}} - \arctan \frac{F}{\sqrt{(4kX_0V - F^2)}} \right) \end{aligned}$$

El valor esperado de X en estado estacionario se determina como:

$$\frac{k}{V}X^2 - F\frac{X}{V} + X_0 = 0$$

En este caso se tienen dos soluciones:

$$X_1 = \frac{1}{2k} \left(F + \sqrt{(F^2 - 4kX_0V)} \right)$$

$$X_2 = \frac{1}{2k} \left(F - \sqrt{(F^2 - 4kX_0V)} \right)$$

Para encontrar la ecuación de la varianza se determina:

$$B(X_1) = \frac{k}{V} \left(\frac{1}{2k} \left(F + \sqrt{(F^2 - 4kX_0V)} \right) \right)^2 + F \frac{\left(\frac{1}{2k} \left(F + \sqrt{(F^2 - 4kX_0V)} \right) \right)}{V} + X_0$$

$$B(X_2) = \frac{k}{V} \left(\frac{1}{2k} \left(F - \sqrt{(F^2 - 4kX_0V)} \right) \right)^2 + F \frac{\left(\frac{1}{2k} \left(F - \sqrt{(F^2 - 4kX_0V)} \right) \right)}{V} + X_0$$

Por otra parte:

$$\begin{aligned} \frac{dA}{dX} &= \frac{d\left(\frac{k}{V}X^2 - F\frac{X}{V} + X_0\right)}{dX} \\ &= \frac{2kX - F}{V} \end{aligned}$$

Evaluando para el estado estacionario se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{dA}{dX_1} &= \frac{\sqrt{(F^2 - 4kX_0V)}}{V} \\ \frac{dA}{dX_2} &= \frac{-\sqrt{(F^2 - 4kX_0V)}}{V} \end{aligned}$$

Por lo tanto, la ecuación para la varianza de las fluctuaciones internas en estado estacionario queda de la forma:

$$\sigma_1^2 = -\frac{1}{2} \frac{\frac{k}{V} \left(\frac{1}{2k} \left(F + \sqrt{(F^2 - 4kX_0V)} \right) \right)^2 + F \left(\frac{1}{2k} \left(F + \sqrt{(F^2 - 4kX_0V)} \right) \right)}{\sqrt{(F^2 - 4kX_0V)}} + X_0$$

$$\sigma_2^2 = +\frac{1}{2} \frac{\frac{k}{V} \left(\frac{1}{2k} \left(F - \sqrt{(F^2 - 4kX_0V)} \right) \right)^2 + F \left(\frac{1}{2k} \left(F - \sqrt{(F^2 - 4kX_0V)} \right) \right)}{\sqrt{(F^2 - 4kX_0V)}} + X_0$$

En este caso, para la solución 1 se obtiene una varianza negativa. Esto es imposible desde el punto de vista físico, de donde se deduce que aunque matemáticamente son posibles varias soluciones, realmente solo es válida la solución correspondiente a X_2 .

Sustituyendo ahora por la variable determinista se obtiene para el valor esperado de estado estacionario:

$$C_2 = \frac{F}{2Vk} \left(1 - \sqrt{(F - 4kC_0V)} \right)$$

mientras que para la varianza se obtiene:

$$\sigma_2^2 = \frac{1}{2} \frac{\left(\frac{1}{2} \left(F - \sqrt{(F^2 - 4kFC_0V)} \right) \right)^2 + F \left(\frac{1}{2k} \left(F - \sqrt{(F^2 - 4kFC_0V)} \right) \right) + VX_0}{V^2 \sqrt{(F^2 - 4kFC_0V)}}$$

El tiempo de autocorrelación temporal está dado por:

$$t_0 = \frac{V}{\sqrt{(F^2 - 4kX_0V)}}$$

Ejercicio propuesto 4.1

Se tiene un proceso cuyo comportamiento determinista está dado por la ecuación diferencial:

$$\frac{dX}{dt} = AX - B$$

Escriba la ecuación de Fokker - Planck correspondiente.

Respuesta:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(X;t)}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial X}(AX - B)P(X;t) \\ & + \frac{1}{2V} \frac{\partial^2}{\partial X^2}(AX + B)P(X;t) \end{aligned}$$

V : tamaño del sistema

4.2. Relación entre la Ecuación Maestra y la Ecuación de Fokker-Plank

La *ecuación de Fokker-Plank* puede ser utilizada para encontrar la solución de la ecuación maestra. Este método es válido cuando el cambio que se produce en el número de partículas en el sistema como resultado de la ocurrencia de un proceso a escala microscópica es despreciable en relación con el número total de partículas presentes en el sistema.

En este caso para la ecuación maestra:

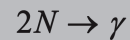
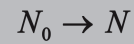
$$\frac{\partial P(n;t)}{\partial t} = \sum_{i=1}^P (E_i^{-k_i} - 1) W_i P \quad 4.2.1$$

la ecuación de Fokker-Plank correspondiente está dada por:

$$\frac{\partial P(n;t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial n} \{k_i W_i(n) P(n;t)\} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial n^2} \{k_i^2 W_i(n) P(n;t)\} \quad 4.2.2$$

Ejercicio resuelto 4.2

Se tiene un proceso en el cual a escala microscópica tienen lugar los siguientes procesos:



donde N_0 es constante y γ representa el exterior del sistema. Establezca la siguiente relación entre la variable macroscópica intensiva y la extensiva:

$$N_0 = qC_0$$

$$X = AC$$

donde A representa el tamaño del sistema.

Obtenga el modelo mesoscópico de estado estacionario a partir de la ecuación de Fokker-Plank.

Solución:

Para el proceso 1, donde se produce un incremento en 1 de la cantidad de partículas, se obtiene:

$$W_1 = N_0$$

$$k_1 = 1$$

para el proceso 2, en el cual se produce la salida de dos partículas del sistema, se obtiene:

$$W_2 = aN^2$$

$$k_2 = -2$$

donde a es una constante.

A partir de las probabilidades de transición por unidad de tiempo y del cambio en el número de entidades se obtiene:

$$A(n) = N_0 - 2aN^2$$

$$B(n) = N_0 + 4aN^2$$

La ecuación de Fokker-Plank correspondiente es:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial N} \left\{ (N_0 - 2aN^2)P \right\} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial N^2} \left\{ (N_0 + 4aN^2)P \right\}$$

Para el estado estacionario se obtiene que el valor esperado del número de partículas es:

$$N_0 - 2aN^2 = 0$$

$$N = \sqrt{\left(\frac{N_0}{2a}\right)}$$

para determinar la varianza de estado estacionario:

$$B = \left(N_0 + 4a \left(\sqrt{\left(\frac{N_0}{2a}\right)} \right)^2 \right)$$

$$= 3N_0$$

$$A' = \frac{d(N_0 - 2aN^2)}{dN}$$

$$= -4aN$$

$$= -4a \sqrt{\left(\frac{N_0}{2a}\right)}$$

$$\begin{aligned}\sigma^2 &= -\frac{1}{2} \frac{3N_0}{4a\sqrt{\left(\frac{N_0}{2a}\right)}} \\ &= \frac{3}{8} \sqrt{2 \frac{N_0}{a}}\end{aligned}$$

Sustituyendo por la variable intensiva:

$$C = \sqrt{\left(\frac{qC_0}{A^2 2a}\right)}$$

$$C = \sqrt{\left(\frac{qC_0}{Aw}\right)}$$

$$w = 2aA$$

donde w es la constante de velocidad macroscópica asociada a la ocurrencia del proceso 2.

Para la varianza se obtiene:

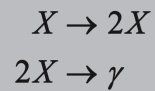
$$\sigma^2 = \frac{3}{8A} \sqrt{4 \frac{qC_0}{Aw}}$$

El tiempo de autocorrelación temporal se determina como:

$$t_0 = \sqrt{\left(4 \frac{w}{A} qC_0\right)}$$

Ejercicio propuesto 4.2

Determine el modelo mesoscópico de estado estacionario a partir de la ecuación de Fokker-Plank para un sistema donde se suponen que tienen lugar los siguientes procesos a escala microscópica:



donde:

$$C = \frac{X}{V}$$

Respuesta: Función de probabilidad normal donde el valor esperado es k/g y la varianza $(k/g)/2V$, donde k y g son las constantes de velocidad asociadas a los procesos microscópicos 1 y 2, respectivamente.



Capítulo

5

Fluctuaciones externas, confiabilidad
y probabilidad de fallas en
procesos tecnológicos



5.1. Ecuaciones diferenciales estocásticas y método de Montecarlo

El método de modelación estocástica basado en la ecuación maestra predice el comportamiento de las fluctuaciones internas, las cuales son causadas por el comportamiento de las partículas microscópicas que describen al sistema bajo estudio. Esto permite obtener el modelo mesoscópico, el cual predice el comportamiento del valor esperado de la variable macroscópica y de las fluctuaciones internas que se producen alrededor de este valor.

En ocasiones, sin embargo, se presentan fluctuaciones en las variables de entrada al sistema bajo estudio. Estas fluctuaciones externas no pueden ser modeladas mediante la ecuación maestra, sino que se requieren otros métodos para ello. La idea fundamental es obtener una ecuación que es función de estas fluctuaciones externas y resolverla, obteniéndose entonces el modelo estocástico del sistema. En este sentido, los métodos analíticos han sido desarrollados a partir de considerar que las fluctuaciones externas tienen una función de probabilidad normal, con valor esperado igual a cero y varianza conocida, y que estas fluctuaciones cumplen con la propiedad de Markov. A partir de estas consideraciones se obtiene una ecuación diferencial estocástica cuya solución es el modelo estocástico. En caso de que estas condiciones no se cumplan es necesario aplicar métodos numéricos de simulación para modelar el comportamiento del sistema, como el método de Montecarlo.

5.2. Modelación estocástica aplicando métodos analíticos.

Para determinar el modelo estocástico analítico del sistema se aplica la siguiente metodología:

1. Obtener el modelo determinista del sistema e identificar la variable estocástica de entrada:

$$5.2.1 \quad \frac{dy}{dt} = f(y, x^*; t)$$

donde y es la variable que describe el comportamiento del sistema, x^* es la variable estocástica de entrada y t es el tiempo.

2. Sustituir en la ecuación determinista la variable estocástica por la suma de su valor esperado más un término ξ que representa las fluctuaciones asociadas a esta variable:

$$5.2.2 \quad \begin{aligned} x^* &= \langle x \rangle + \Gamma \xi \\ \frac{dy}{dt} &= f(y, \langle x \rangle + \sqrt{\Gamma} \xi; t) \end{aligned}$$

donde Γ es un término que representa la magnitud de las fluctuaciones, de forma que:

$$5.2.3 \quad \Gamma = \sigma_x^2$$

3. La ecuación (5.2.3) debe ser expresada de la forma:

$$5.2.4 \quad \begin{aligned} \frac{dy}{dt} &= A(y) + C(y) \sqrt{\Gamma} \xi \\ dy &= A(y) dt + C(y) \sqrt{\Gamma} \xi dt \end{aligned}$$

4. Se puede demostrar que debido a que las fluctuaciones son gaussianas y cumplen con la propiedad de Markov, se obtiene

$$\xi dt = dW \quad 5.2.5$$

donde W es una variable estocástica cuya función de distribución de probabilidad es un proceso de Weiner, de forma que la ecuación diferencial estocástica que describe al sistema bajo estudio está dada por:

$$dy = A(y)dt + C(y)\sqrt{\Gamma}dW \quad 5.2.6$$

5. La ecuación de Fokker-Plank correspondiente a la ecuación (5.2.6) es:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(y;t)}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial y} \left\{ \left[A(y) + \frac{1}{2}\sqrt{\Gamma}C(y)\frac{d\sqrt{\Gamma}C(y)}{dy} \right] P(y;t) \right\} \\ & + \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \{ C^2(y)P(y;t) \} \end{aligned} \quad 5.2.7$$

6. La solución de la ecuación (5.2.7) constituye el modelo estocástico analítico del sistema bajo estudio.

Ejercicio resuelto 5.2

Se tiene un sistema cuya ecuación determinista está dada por:

$$5.2.8 \quad \frac{dC}{dt} = kC + fC_0 - fC$$

donde C es la variable que describe el comportamiento del sistema, f y C_0 son variables de entrada y k es un parámetro del sistema. Determine el modelo estocástico de este sistema, para operación en estado estacionario, si se conoce que f es una variable estocástica con una función de distribución normal y donde el tiempo de autocorrelación temporal puede considerarse despreciable en relación con el intervalo de tiempo en que se realizan las observaciones. *

* Debido a que $\Delta t \gg t_0$ se puede considerar que las fluctuaciones cumplen con la propiedad de Markov.

Solución:

La variable estocástica de entrada se expresa de la forma:

$$f = \langle f \rangle + \sqrt{\sigma_f^2} \xi$$

de donde la ecuación diferencial estocástica queda entonces como:

$$\frac{dC}{dt} = kC + (C_0 - C) \left(\langle f \rangle + \sqrt{\sigma_f^2} \xi \right)$$

$$\frac{dC}{dt} = kC + (C_0 - C) \langle f \rangle + (C_0 - C) \sqrt{\sigma_f^2} \xi$$

$$dC = \{kC + (C_0 - C) \langle f \rangle\} dt + \{(C_0 - C) \sqrt{\sigma_f^2}\} \xi dt$$

$$dC = \{kC + (C_0 - C) \langle f \rangle\} dt + \{(C_0 - C) \sqrt{\sigma_f^2}\} dW$$

La ecuación de Fokker-Plank correspondiente es:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial C} \left\{ \left[\{kC + (C_0 - C)\langle f \rangle\} + \frac{1}{2} \{(C_0 - C)^2 \sqrt{\sigma_f^2}\} \frac{d\{(C_0 - C)^2 \sqrt{\sigma_f^2}\}}{dC} \right] P \right\} \\ + \frac{\sigma_f^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial C^2} \{(C_0 - C)^2 P(y; t)\}$$

Para el valor esperado se obtiene:

$$\frac{dC}{dt} = (k - f)C + fC_0 + \frac{1}{2} \sigma_f^2 (C - C_0) \\ \frac{dC}{dt} = \left(k - f + \frac{1}{2} \sigma_f^2 \right) C + C_0 \left(f - \frac{1}{2} \sigma_f^2 \right)$$

Para el estado estacionario se obtiene:

$$C = \frac{C_0 \left(f - \frac{1}{2} \sigma_f^2 \right)}{\left(f - \frac{1}{2} \sigma_f^2 - k \right)}$$

Nótese que, en este sistema el valor esperado de la variable que lo describe es influenciado por las fluctuaciones externas, por lo que el modelo determinista describe de modo adecuado al sistema solo cuando:

$$f \gg \frac{1}{2} \sigma_f^2$$

Para obtener la varianza se determina:

$$-\frac{d\left(\left(k-f+\frac{1}{2}\sigma_f^2\right)C+C_0\left(1-\frac{1}{2}\sigma_f^2\right)\right)}{dC} = f-k-\frac{1}{2}\sigma_f^2$$

$$\sigma_C^2 = \frac{1}{2} \frac{\sigma_f^2 C_0^2 \left(1 - \frac{\left(f - \frac{1}{2}\sigma_f^2\right)^2}{\left(f - \frac{1}{2}\sigma_f^2 - k\right)}\right)}{f - k - \frac{1}{2}\sigma_f^2}$$

El tiempo de autocorrelación temporal está dado por:

$$t_C = \frac{1}{f - k - \frac{1}{2}\sigma_f^2}$$

Ejercicio propuesto 5.2

Escriba la ecuación diferencial estocástica del proceso correspondiente al Ejercicio resuelto 5.2 considerando que la variable estocástica es C_0 .

Respuesta:

$$dC = (kC - fC + f(C_0))dt + f\sqrt{\Gamma_{C_0}} dW$$

5.3. Método de Montecarlo

El método de Montecarlo es un procedimiento que se emplea para obtener el modelo estocástico de estado estacionario del sistema mediante la simulación de una realización del mismo.

Esta realización se lleva a cabo de la siguiente manera:

1. Obtener la ecuación determinista del sistema bajo estudio.
 2. Identificar la variable estocástica de entrada al sistema y determinar su función de probabilidad correspondiente.
 3. Obtener un valor aleatorio de la variable de entrada tomando en cuenta su función de probabilidad inversa.
 4. Sustituir la variable aleatoria de entrada obtenida en 3) en el modelo determinista y calcular la variable de salida.
 5. Repetir 3 y 4 hasta obtener una realización completa del proceso (comportamiento estocástico simulado de la variable de salida).
 6. Tomar los datos obtenidos en 5) y ajustarle la función de probabilidad correspondiente mediante métodos estadísticos, o calcular los momentos de esta distribución.
- Nótese que este método requiere de conocer los datos relativos al comportamiento de la variables y los parámetros del sistema, ya que es un método numérico.

Ejercicio resuelto 5.3

Se tiene un sistema cuya ecuación determinista de estado estacionario es:

$$Y = \frac{5}{\sqrt[2]{X}}$$

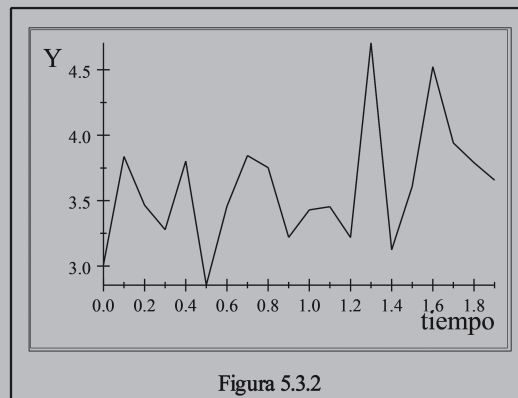
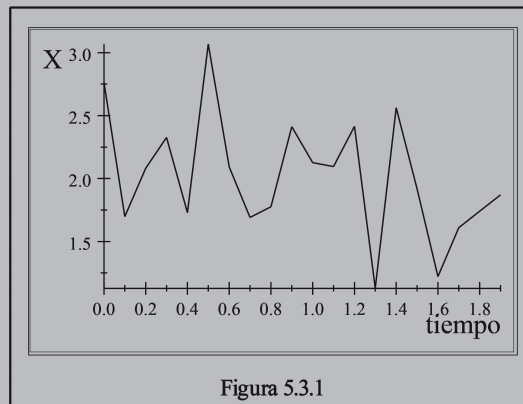
se conoce que X es una variable estocástica con una función de probabilidad normal con valor esperado igual a 2 y una desviación estándar de 0.5. Determine el comportamiento de la media y la varianza de la variable de salida.

Solución:

Se tomará un intervalo de tiempo igual a 0.1 para simular la realización del proceso.

Se generan un conjunto de valores aleatorios para la variable X , tomando en cuenta la inversa de la función de probabilidad normal con valor esperado igual a 2 y desviación estándar de 0.5. Este comportamiento se muestra en la Figura 5.3.1.

Se evalúan los valores de Y correspondientes a cada uno de los valores aleatorios de X , obteniéndose la realización del proceso que se muestra en la Figura 5.3.2.



Al conjunto de valores de Y obtenidos mediante simulación se le determinan los diferentes momentos de su distribución de probabilidad. En este caso para el valor esperado:

$$\langle Y \rangle = 3.5984$$

para la varianza:

$$\langle (Y - \langle Y \rangle)^2 \rangle = 0.211$$

para el tercer momento con respecto a la media:

$$\langle (Y - \langle Y \rangle)^3 \rangle = 0.06$$

para el cuarto momento:

$$\langle (Y - \langle Y \rangle)^4 \rangle = 0.139$$

Debido a que los momentos de orden mayor que 2 no pueden ser despreciados, la función de probabilidad correspondiente no es normal.

Ejercicio propuesto 5.3

Se tiene un sistema cuya ecuación determinista está dada por:

$$z = 3 \exp(-0.03T)$$

obtenga la media y la varianza de la variable z si se conoce que tiene una función de distribución normal con valor esperado de 30 y desviación estándar de 5.

Respuesta: El valor medio es de 1.26 con una desviación estándar de 0.18

5.4. Confiabilidad y probabilidad de fallas en procesos tecnológicos

La gran mayoría de los procesos tecnológicos son concebidos y diseñados contemplando obtener un producto que debe cumplir con un conjunto de especificaciones, lo que se asegura a través del control apropiado de un conjunto de variables durante el proceso de fabricación. Visto desde este enfoque, teóricamente el proceso debe operar de tal forma que se garantice que el producto mantenga siempre la calidad especificada. Sin embargo, en la práctica pueden ocurrir eventos que causen que las variables de proceso se desvíen de los valores establecidos, trayendo como resultado una afectación de la calidad del producto. Estos eventos ocurren de forma aleatoria y tienen su origen fundamental en la interacción del sistema con su entorno.

La confiabilidad de un proceso se define como la probabilidad de que el producto cumpla con las especificaciones establecidas. Para un proceso en estado estacionario, donde la calidad del producto se evalúa a través del comportamiento temporal de una o varias propiedades químico físicas de este que se monitorean en el tiempo, esta confiabilidad Q se identifica con la fracción del tiempo total de operación durante la cual la variable que cuantifica la calidad se encuentra dentro de los valores especificados en el diseño.

La probabilidad de fallas F , por otra parte, se identifica con la probabilidad de que el producto no cumpla con las especificaciones establecidas, cumpliéndose en este caso que:

$$F = 1 - Q$$

Los procedimientos de diseño de muchos equipos toman en cuenta la posibilidad de fallas mediante la inclusión de factores de seguridad, los cuales se establecen la mayoría de las veces con base en criterios empíricos.

Por ejemplo, cuando se diseña un intercambiador de calor, se introduce el término factor de obstrucción, a partir del cual el área del intercambiador se calcula en un % superior a la estrictamente requerida para garantizar las temperaturas de entrada y salida especificadas, de tal forma que se mantengan estas condiciones aun cuando haya una disminución apreciable de la capacidad de transferencia debido a la formación de incrustaciones en los tubos.

Los métodos estocásticos basados en las fluctuaciones externas constituyen una vía interesante para establecer los parámetros de diseño de un proceso tomando en cuenta explícitamente la confiabilidad sin necesidad de recurrir a criterios empíricos.

Para esto se puede aplicar la siguiente metodología general:

1. Identificar la variable que cuantifica la calidad del producto y obtener el modelo determinista en estado no estacionario del comportamiento de esta variable con respecto a otras variables y parámetros del proceso.
2. Identificar las variables y parámetros del proceso que muestran un comportamiento aleatorio en el tiempo y determinar el valor esperado y la varianza de estos.
3. A partir de la ecuación determinista y los promedios y varianzas especificados escribir la ecuación diferencial estocástica que describe el comportamiento estocástico de la variable que cuantifica la calidad.
4. Resolver la ecuación diferencial estocástica para obtener la función de distribución de probabilidad que describe el comportamiento de la variable de interés.
5. Calcular los parámetros de diseño que garantizan que la variable se encuentre dentro del intervalo de valores establecidos, con una probabilidad especificada.

Ejercicio resuelto 5.4

Se tiene un proceso donde el comportamiento temporal de la variable que caracteriza la calidad del producto está dado por:

$$\frac{dy}{dt} = fy_0 - ky - fy$$

Se concibe para operar en estado estacionario, donde la eficiencia del proceso se define como:

$$E_f = \frac{y_0 - y}{y_0}$$

y la confiabilidad con base en la probabilidad de que el valor de y se encuentre en el intervalo (y_1, y_2)

Se conoce que y_0 es estocástica con un valor esperado O y una varianza V , con un tiempo de autocorrelación temporal que puede considerarse despreciable. Se consideran como parámetros de diseño k y f .

Proponga una metodología de diseño concebida para que el proceso opere con una eficiencia E y una confiabilidad Q .

Solución:

El primer paso para la solución de este problema consiste en obtener la ecuación diferencial estocástica que describe el comportamiento de y :

$$y_0 = O + \sqrt{V}\xi$$

de tal forma que sustituyendo en la ecuación diferencial temporal:

$$\frac{dy}{dt} = f(O + \sqrt{V}\xi) - ky - fy$$

esta ecuación se reescribe como:

$$dy = (fO - ky - fy)dt + f\sqrt{V}\xi dt$$

como el tiempo de autocorrelación temporal para q_0 se considera despreciable se puede suponer un proceso Markoviano, de tal forma que:

$$\xi dt = dW$$

$$dy = (fO - ky - fy)dt + f\sqrt{V}dW$$

La ecuación de Fokker Planck correspondiente a esta ecuación diferencial estocástica está dada por:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial y}(fO - ky - fy)P + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2}f^2VP$$

Se trata de una ecuación de Fokker Planck lineal, con una solución analítica exacta que se corresponde con una función de distribución normal. En este caso se tiene para el valor esperado Y y la varianza de y :

$$\frac{dY}{dt} = fO - kY - fY$$

$$\frac{d\sigma}{dt} = -2(k + f)\sigma + f^2V$$

En estado estacionario se obtiene:

$$Y = O\frac{f}{f + k}$$

$$\sigma = V\frac{f^2}{2f + 2k}$$

Conviene, por simplificación, enunciar las expresiones de valor esperado y varianza en función del valor esperado de la eficiencia, de tal forma que:

$$Y = OE$$

$$\sigma = \frac{Vf}{2} E$$

donde:

$$E = \frac{f}{f+k}$$

La probabilidad asociada a y está dada por:

$$P = C \exp\left(-\frac{(y-OE)^2}{2VfE}\right)$$

La constante de integración C toma en cuenta los posibles valores que puede tomar la variable y . En este caso, atendiendo el valor de la varianza de y_0 se tendrá que los valores extremos de esta variable son:

$$y_0 = O \pm 2\sqrt{V}$$

de tal forma que considerando la ecuación determinista se tendrá que los valores posibles para la variable y se encuentran dentro del intervalo:

$$\left(O - 2\sqrt{V}\right) \frac{f}{f+k}, \left(O + 2\sqrt{V}\right) \frac{f}{f+k}$$

A partir de estos criterios se tiene que la constante de integración C está dada por:

$$C = \frac{1}{2} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi} \operatorname{erf}\left(\sqrt{\frac{4E}{f}}\right)} \sqrt{\frac{2}{EVf}}$$

y la función de probabilidad se escribe:

$$P(y) = \frac{1}{2} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi} \operatorname{erf}\left(\sqrt{\frac{4E}{f}}\right)} \sqrt{\frac{2}{EVf}} \exp\left(-\frac{(y-OE)^2}{VfE}\right)$$

Por tanto, la confiabilidad Q asociada a que y se encuentre entre los valores y_1 y y_2 está dada por:

$$Q = \frac{1}{2} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi} \operatorname{erf}\left(\sqrt{\frac{4E}{f}}\right)} \sqrt{\frac{2}{EVf}} \int_{y_1}^{y_2} \exp\left(-\frac{(y-OE)^2}{VfE}\right) dy$$

$$Q = \frac{\left(\operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{1}{VfE}}(y_2-OE)\right) - \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{1}{VfE}}(y_1-OE)\right)\right)}{2\left(\operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{4}{f}}E\right) - 1\right)}$$

donde $\operatorname{erfc}(x)$ representa la función error complementaria.

Se propone el siguiente procedimiento de diseño:

- Especificar el valor esperado O y la varianza V de y_0 .
- Especificar el valor esperado de eficiencia E
- Especificar el intervalo de valores permitido para y (y_1, y_2) y la confiabilidad Q con la cual se quiere operar. A partir de estas especificaciones se determina mediante métodos numéricos el valor del parámetro de diseño f a partir de la ecuación:

$$Q = \frac{\left(\operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{1}{VfE}}(y_2 - OE)\right) - \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{1}{VfE}}(y_1 - OE)\right)\right)}{2\left(\operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{4}{f}}E\right) - 1\right)}$$

Con el valor de f calculado se determina el valor del parámetro de diseño k a partir de la relación:

$$k = \frac{f}{E} - f$$

Ejercicio propuesto 5.4

El comportamiento temporal de la concentración de DBO a la salida de un tanque de compensación está dado por:

$$V \frac{dx}{dt} = qx_0 - qx$$

donde q es el flujo de entrada y salida del sistema, V es el volumen del tanque de compensación y x_0 es la concentración de DBO a la entrada, la cual tiene un valor esperado x_0 con varianza K .

Determine el volumen del tanque de compensación requerido para garantizar que las fluctuaciones en la DBO a la salida del tanque disminuyan en un 60%.

Resultado: El volumen del tanque se determina como $V = 5q/6$



Capítulo

6

Dimensión fractal y su empleo para
el estudio de superficies sólidas



6.1. Concepto de dimensión

La palabra *dimensión* se define, de forma general, como un aspecto o faceta de algo, teniendo diversos usos de acuerdo al contexto en el cual se trata. Por ejemplo, puede tratarse de una característica de un determinado asunto, como cuando se plantea «la dimensión económica de las medidas tomadas por el gobierno indica una medida de la crisis a la que se enfrenta» o «el estudiante no entiende la dimensión de sus problemas disciplinarios».

Desde el punto de vista científico, la dimensión se relaciona con el tamaño de algún objeto, es decir, con el espacio total que este objeto ocupa y el número de coordenadas espaciales que son necesarias para definir este tamaño. Así, un punto es un objeto que tiene dimensión cero; un conjunto de puntos forma una línea, la cual tiene dimensión espacial 1, donde el tamaño de un objeto contenido dentro de esta línea se caracteriza a través de la longitud; un conjunto de líneas forma un espacio de dos dimensiones (plano), y el tamaño de un objeto alojado en éste se relaciona con el área ocupada por este objeto; un conjunto de planos forma un espacio de tres dimensiones, y el tamaño de un objeto dentro de este se identifica con el volumen. En la geometría euclidiana, que es la que habitualmente se emplea para la medición y diseño de objetos, la dimensión de un espacio dado se relaciona con el número de coordenadas que se necesitan para localizar un objeto en dicho espacio. Debido a nuestra precepción del mundo, el número máximo de dimensiones que pueden ser visualizadas es igual a tres, aunque en determinados contextos de la física y la matemática se puede eventualmente trabajar con espacios con más de tres dimensiones. En la Figura 1 se muestra un tesseracto o hipercubo, que corresponde a una representación en un espacio de cuatro dimensiones.

▪ HIPERCUBO

un **teseracto** o **hipercubo** es una figura formada por dos cubos tridimensionales desplazados en un cuarto eje dimensional en un espacio tetradimensional, el tesseracto es un cubo de cuatro dimensiones espaciales. Se compone de 8 celdas cúbicas, 24 caras cuadradas, 32 aristas y 16 vértices, esto tomando en cuenta el desarrollo del polinomio

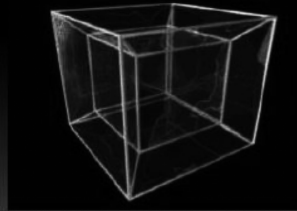


Figura 1. Visualización de un objeto cúbico en cuatro dimensiones

El cálculo del tamaño de un objeto depende del número de dimensiones del espacio en el cual este se encuentra situado, así como de la morfología particular que presenta este objeto. El punto tiene un tamaño igual a cero. La medición del tamaño de una línea, la cual se encuentra en un espacio unidimensional, se establece a partir de un determinado patrón de longitud l_0 . Así, el tamaño de la línea se define con base en la cantidad de segmentos, de longitud l_0 que se necesitan para cubrirla completamente a esta, según se ilustra en la Figura 2. Evidentemente, el valor numérico de la longitud de una línea depende del patrón de longitud seleccionado, así como de las unidades de medida que se emplean para esto (centímetros, metros, pies, pulgadas, etc.)

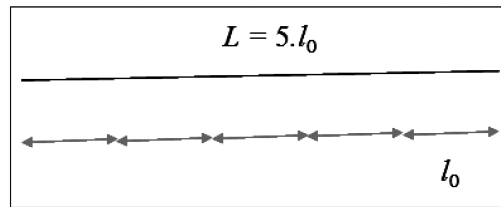


Figura 2. Medición de la longitud de una línea

La determinación del tamaño de un objeto instalado en un espacio de dos dimensiones depende de la forma de éste. La figura más simple que se puede representar en un espacio en dos dimensiones es un rectángulo, cuya área (tamaño) se determina como el producto de la longitud por el ancho (Figura 3).

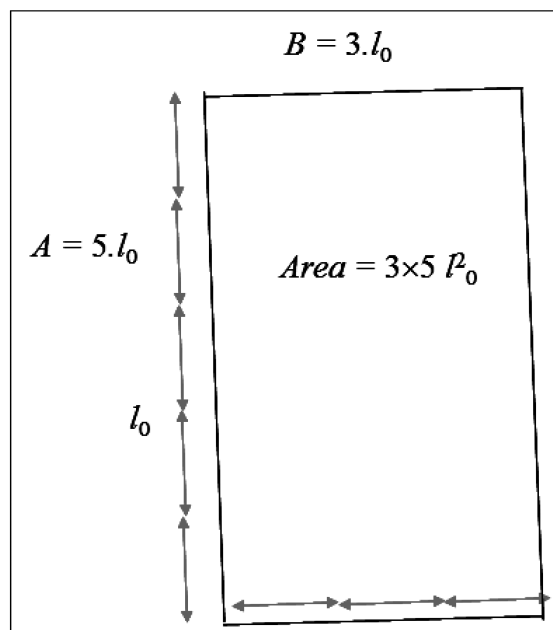


Figura 3. Determinación del tamaño de un objeto en dos dimensiones

El rectángulo es una figura muy simple, ya que sus lados son paralelos a los ejes de coordenadas del espacio en dos dimensiones. La deducción del valor del área de una figura con bordes curvos ya resulta más complicada, como es el caso del área de un círculo, la cual se determina como:

$$A = \pi R^2$$

donde R es el radio del círculo. Se pueden tener figuras más complicadas, como la que se muestra en la Figura 4, en la cual el área se determina contando el número de cuadrados que se encuentran inmersos en esta.

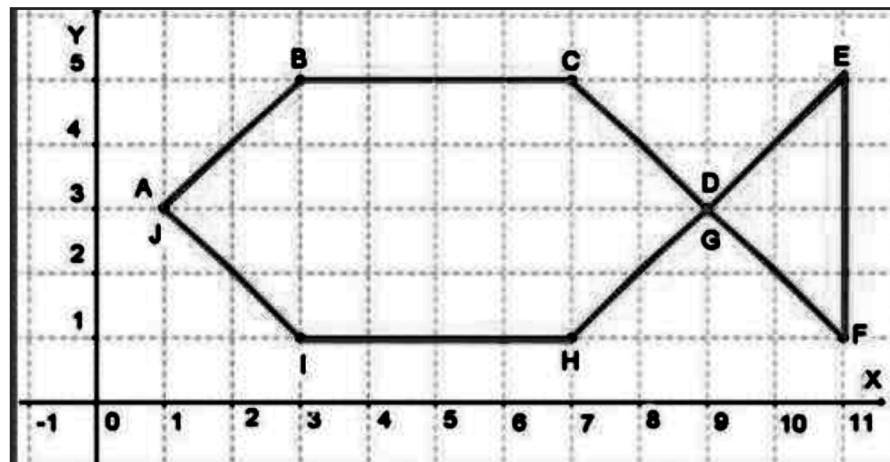


Figura 4. Determinación del área de una figura regular mediante conteo de los cuadrados contenidos en esta

Para el cálculo del volumen (tamaño) de un objeto de tres dimensiones se sigue un procedimiento semejante, pero involucrando una coordenada adicional (Figura 5).

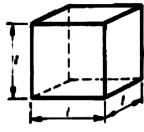
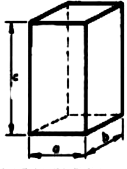



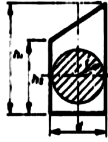
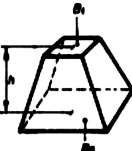
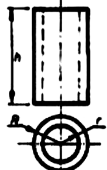


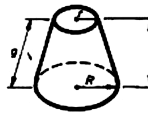
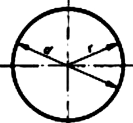
FIGURA	FORMULAS	FIGURA	FORMULAS
 CUBO	$V = l^3$	 PARALELOGRAMO	$V = a \cdot b \cdot c$
 PRISMA	$V = B \cdot h$ B - base área de la figura geométrica de que se trate	 CILINDRO	$V = \pi r^2 \cdot h$ $V = \frac{\pi d^2}{4} \cdot h = 0,785d^2 \cdot h$
 PIRAMIDE	$V = \frac{1}{3} B \cdot h$ B - base área de la figura geométrica de que se trate	 CILINDRO TRUNCADO	$V = 1,5708 r^2 (h_1 + h_2)$ $V = 0,3927d^2 (h_1 + h_2)$
 PIRAMIDE TRUNCADA	$V = \frac{h}{3} (B_1 + B_2 + \sqrt{B_1 \cdot B_2})$ B ₁ - base menor B ₂ - base mayor	 CILINDRO HUECO	$V = \pi \cdot h (R^2 - r^2)$ $V = \frac{\pi}{4} h (D^2 - d^2)$
 CONO	$V = \frac{\pi}{3} r^2 h$	 TORO CIRC.	$V = 2\pi Rr^2$ $V = \pi^2 De \cdot$
 CONO TRUNCADO	$V = \frac{\pi}{3} h (R^2 + Rr + r^2)$ $V = 0,2618h (D^2 + Dd + d^2)$	 ESFERA	$V = \frac{4}{3} \pi r^3$ $V = \frac{\pi}{6} d^3$

Figura 5. Cálculo del volumen de diferentes objetos regulares

Los ejemplos mostrados anteriormente, aunque pueden presentar determinadas complicaciones matemáticas debido a la forma de la figura, corresponden todos a objetos regulares, los cuales pueden ser descritos de forma apropiada a través de la geometría euclidiana. Si bien este método resulta adecuado para el estudio y diseño de objetos construidos por el hombre, la naturaleza es mucho más rica, y de forma general encontramos muy pocos objetos naturales que puedan ser considerados como euclidianos. Como es evidente, las nubes no son esferas, las montañas no son conos (Figura 6), los continentes, aunque se parecen a triángulos o cuadrados, en realidad muestran morfologías muy irregulares (Figura 7).



Figura 6. Nubes y montañas

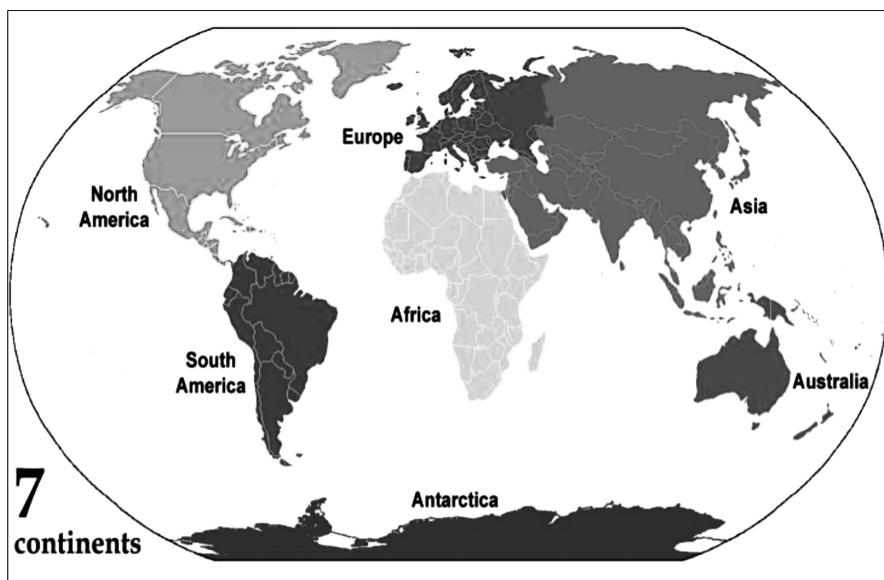


Figura 7. Forma de los continentes

6.2. Estimación de la dimensión de una línea irregular

Si el procedimiento expuesto anteriormente se aplica a la determinación de la longitud de una línea irregular ocurre una cosa muy curiosa. Debido a que el patrón de medición utilizado es un segmento de línea recta, al superponer el mismo sobre la línea ocurre que, si la longitud del patrón es demasiado alta, existirán secciones en las cuales la longitud medida resulta menor que la longitud real, lo cual se debe a la presencia de las irregularidades. La solución en este caso consiste en seleccionar un patrón de longitud menor, de tal manera que estas irregularidades puedan ser mejor cuantificadas (Figura 8). Sin embargo, en los objetos naturales, como por ejemplo las costas (Figura 9), se encuentran irregularidades que se repiten independientemente de la magnificación de la escala, de tal manera que si la longitud del patrón es muy pequeña (para una costa, debe tender al tamaño de un átomo), resulta que la línea tiene una longitud que

tiende a infinito. Este resultado indica que la determinación del tamaño de las figuras irregulares a través de los conceptos clásicos de la geometría euclidiana resulta una tarea muy difícil de acometer. Afortunadamente este problema fue resuelto el siglo pasado a través de la creación de la geometría fractal.

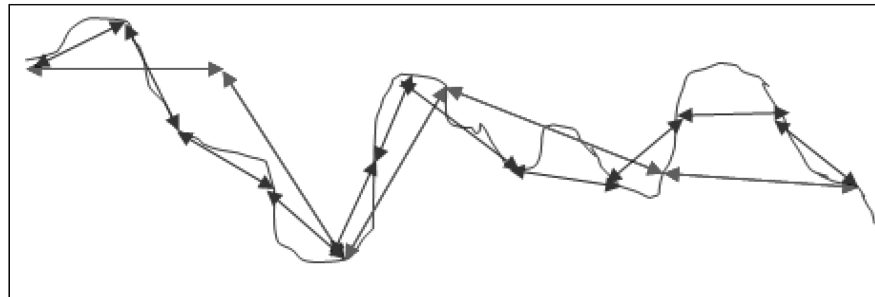


Figura 8. Medición de la longitud de una línea irregular a partir de diferentes patrones



Figura 9. Forma de las costas

6.3. Definición de objetos fractales

Un fractal es un objeto geométrico cuya estructura básica, fragmentada o irregular, se repite a diferentes escalas. El término fue propuesto por el matemático Benoît Mandelbrot en 1975 y deriva del latín fractus, que significa quebrado o fracturado. Los fractales son objetos que, debido a la complejidad de su morfología, no pueden describirse mediante la geometría euclidiana. De hecho, de lo que se trata es de describir estos objetos a partir de propiedades estadísticas generales, las cuales se repiten a diferentes escalas de magnificación. Los fractales matemáticos pueden ser obtenidos a partir de la iteración de determinados algoritmos, como los que se muestran en la Figura 10. De manera general, los fractales tienen dos propiedades generales:

- Autosimilitud: El objeto muestra las mismas propiedades estadísticas a diferentes niveles de magnificación. De hecho, su morfología como un todo está generada por la repetición a escalas cada vez más pequeñas de una morfología semejante.
- Autoafinidad: El tamaño del objeto puede ser estimado a partir de una función de potencias cuyo exponente se corresponde con la dimensión fractal.

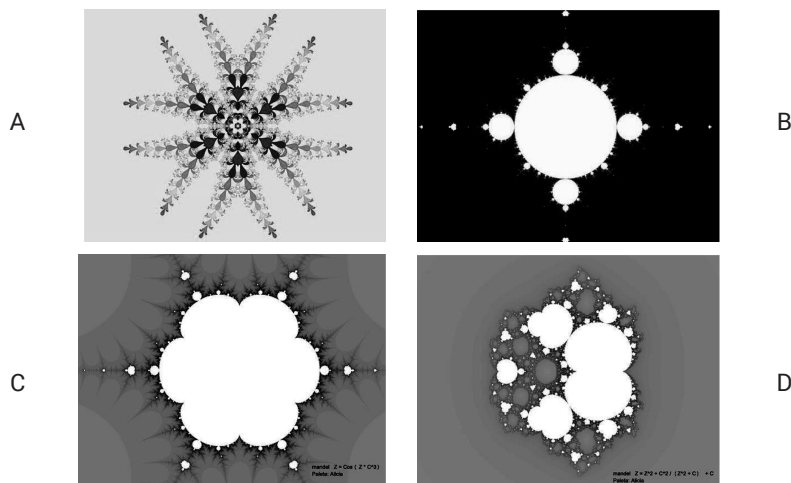


Figura 10. Fractales obtenidos mediante la iteración de algoritmos matemáticos

6.4. Definición de dimensión fractal

De acuerdo con la geometría fractal, la dimensión fractal D es un número real, generalmente fraccionario, que permite generalizar el concepto de dimensión para objetos irregulares. Este número es un exponente que cuantifica en qué medida el objeto llena el espacio euclidiano en el cual el mismo se encuentra alojado. Desde el punto de vista matemático existen diferentes maneras de definir la dimensión fractal dependiendo de los aspectos que se deben considerar. De esta manera se define la dimensión de Hausdorff-Besicovitch, la dimensión de empaquetamiento, la dimensión de homotecia y las dimensiones de Rényi. Ninguna de estas puede ser considerada como absoluta para todos los casos, ni tienen el mismo valor para un mismo objeto, ya que esto depende de las características internas propias de cada objeto fractal. Aunque puede darse el caso de que para un mismo fractal tengan el mismo valor, no pueden considerarse como magnitudes equivalentes.

En la práctica, algunas definiciones de dimensión fractal resultan más sencillas de calcular, y por eso son las más ampliamente usadas. Entre estas se encuentra la dimensión determinada por el método de conteo de cajas, la cual es la más sencilla de interpretar, por su implementación logarítmica. En general, la dimensión fractal es diferente que la dimensión topológica. Así, una línea irregular, que tiene como dimensión topológica un valor igual a 1, tiene un valor de dimensión fractal que es un número no entero que se encuentra entre 1 y 1.5. En este caso, la línea irregular requiere de dos dimensiones para poder representarse adecuadamente (por ejemplo, en un plano), pero no puede considerarse como una figura en dos dimensiones. Es como si fuera demasiado grande para ser tratada como un objeto de una dimensión, pero demasiado pequeña para considerarse como un objeto de dos dimensiones.

La longitud de una línea fractal se estima a partir de la expresión:

$$L = k.l^f$$

donde k es un parámetro que toma en cuenta el nivel de magnificación considerado, l es la distancia de la línea recta que une los puntos inicial y final de la línea y f es la dimensión fractal.

Para los fractales matemáticos existen diferentes maneras de determinar la dimensión fractal, de tal forma que el valor calculado es exacto. Esto no ocurre así para el caso de los objetos naturales, donde lo que puede hacerse es estimar la dimensión fractal a partir de una imagen o fotografía en dos dimensiones del objeto en cuestión. Su cálculo requiere de la aplicación de diferentes métodos de tratamiento de imágenes y de determinación de la dimensión fractal, para lo cual se dispone de diferentes softwares disponibles libremente en internet.

6.5. Cálculo de la dimensión fractal por el método de conteo de cajas

Uno de los métodos más sencillos para calcular la dimensión fractal es el denominado por conteo de cajas, el cual se basa en convertir la imagen del objeto bajo estudio (Figura 11.a) en una imagen binaria (píxeles negros y blancos) (Figura 11.b) y dividir el plano donde está contenida esta imagen en celdillas de tamaño l_0 (Figura 11.c). Se cuentan entonces en cuantas celdillas se encontraron píxeles de color negro. Este proceso se repite, disminuyendo el tamaño de las celdillas hasta un valor relativamente muy pequeño. El próximo paso consiste en construir un gráfico, donde en el eje de las x se muestra el logaritmo del inverso del tamaño de las celdillas y en el eje de las y , el logaritmo del número correspondiente de celdas ocupadas por píxeles negros. La pendiente de este gráfico se corresponde con el valor de la dimensión fractal (Figura 11.d), de tal manera que esta se representa como:

$$f = -\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\ln N(\varepsilon)}{\ln \frac{1}{\varepsilon}}$$

donde ε representa el tamaño de la celda. En este caso, el objeto analizado (Figura 11.a) tiene un valor de dimensión fractal igual a 1.1935.

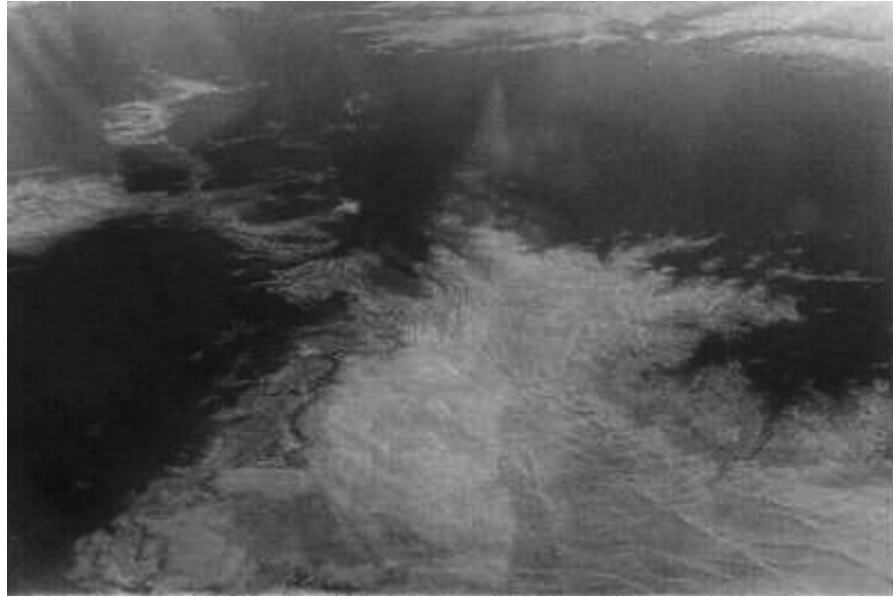


Figura 11.a. Fotografía aérea de una costa

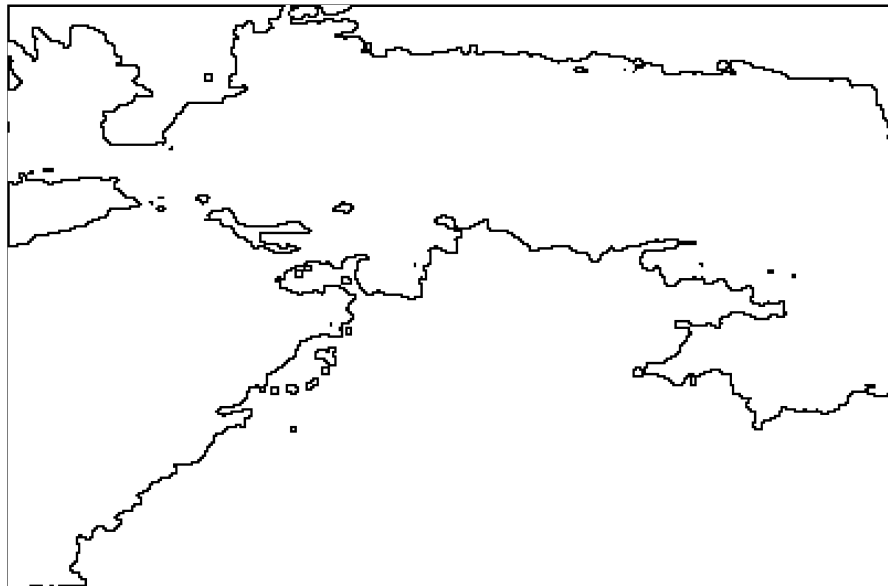


Figura 11.b. Contorno de la costa

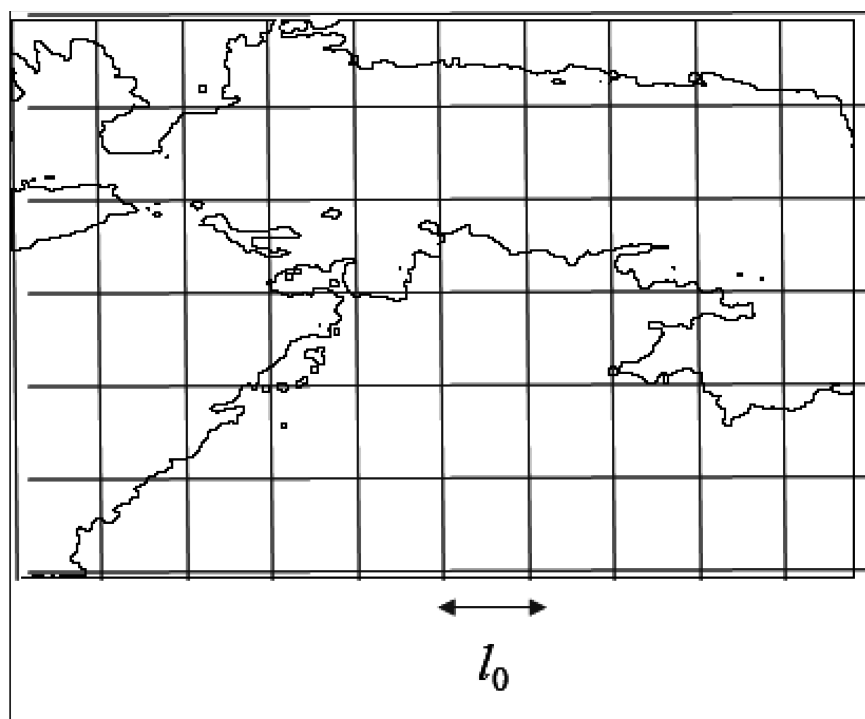


Figura 11.c. Método del conteo de cajas

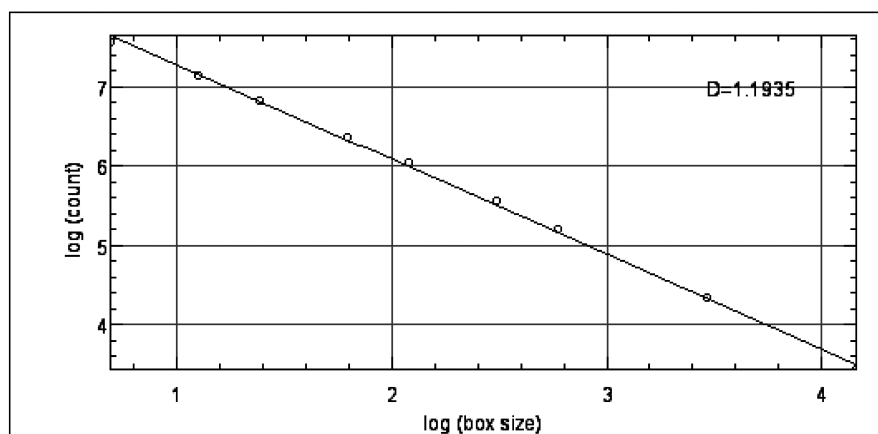


Figura 11.d. Estimación de la dimensión fractal por el método del conteo de cajas

El método descrito anteriormente es válido para determinar no solo la dimensión de líneas irregulares, sino también para analizar las imágenes de objetos en dos dimensiones, como el que se muestra en la Figura 12a, que corresponde a la hoja de una planta. Igual que en el caso de una línea, se requiere convertir la imagen en binaria, dividirla en celdas y contar el número de celdas ocupadas. Esta imagen tiene una dimensión fractal igual a 1.7786. Nótese que este objeto, que es visualizado en dos dimensiones, tiene una dimensión fractal menor que la unidad, ya que el mismo no ocupa toda el área disponible.



Figura 12.a. Imagen de la hoja de una planta

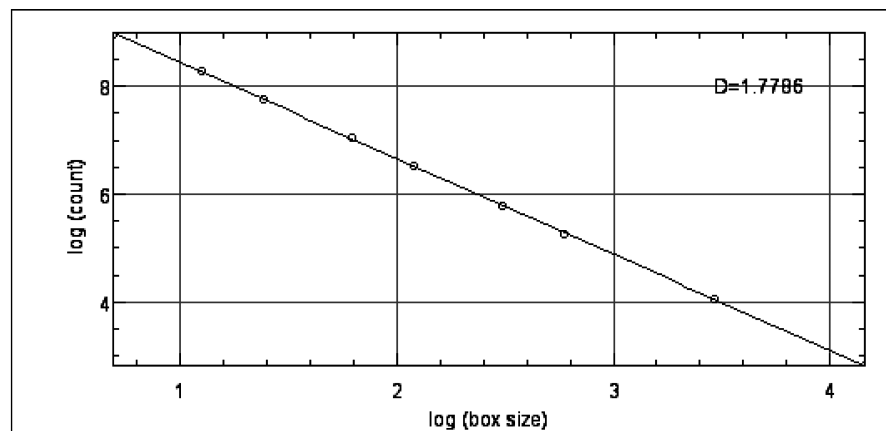


Figura 12.b. Dimensión fractal de la hoja de una planta

6.6. Aplicación de la dimensión fractal en el estudio de superficies sólidas

Las superficies sólidas, a diferencia de las interfaces líquido-líquido y líquido-gas, se caracterizan porque su área superficial depende de una forma compleja de diferentes factores, entre los cuales se pueden mencionar la composición química del sólido, los procesos involucrados en la formación del mismo y otros relacionados con el efecto del ambiente sobre la superficie. En este sentido, aun cuando en la escala macroscópica una superficie parece ser lisa, en una escala más pequeña se pueden observar múltiples irregularidades, de tal forma que el área superficial en realidad resulta mucho mayor que la que se corresponde con una superficie lisa. Desde el punto de vista clásico, la rugosidad de una superficie se identifica con el valor promedio de la diferencia de alturas que se observa en la escala microscópica. La rugosidad de una superficie sólida juega un importante papel en el campo de la ingeniería, donde se pueden mencionar como ejemplos que el incremento de la rugosidad de la pared de los tubos a través de los cuales se transportan los fluidos aumenta la caída de presión y se asocia con la ampliación de la magnitud de las fluctuaciones en la velocidad. Los materiales de construcción con mayor rugosidad implican un mayor consumo de pintura con fines decorativos y de protección; si hablamos de neumáticos, la probabilidad de ocurrencia de accidentes es mayor cuando pierden rugosidad debido a su uso y envejecimiento.

No se dispone aún de ecuaciones generales, válidas para todos los casos, para predecir el valor exacto del área de una superficie sólida, siendo necesaria su determinación experimental. Una de las características más interesantes que se encuentran es que el valor del área superficial de un mismo sólido depende del método de medición empleado.

Existen dos métodos clásicos que se emplean para la medición del área superficial por unidad de volumen, o área superficial específica, de un

sólido. El primero tiene un fundamento termodinámico y se basa en la medición del calor de inmersión generado cuando un sólido se introduce en un líquido en el cual es insoluble. El segundo se basa en sumergir el sólido en un líquido en el cual es soluble, y medir el comportamiento del sólido disuelto con respecto al tiempo, donde la velocidad de disolución inicial es directamente proporcional al área del sólido. Ambos métodos solo permiten hacer una estimación gruesa del área superficial del sólido.

Actualmente se puede emplear un tercer método, basado en el análisis morfológico de las imágenes de la superficie obtenidas para diferentes niveles de magnificación. La rugosidad de una superficie puede expresarse a través del exponente de rugosidad local α , que toma en cuenta la magnitud de las fluctuaciones que se presenta en la diferencia de altura entre los puntos espaciales de una superficie. El valor de este exponente se relaciona con la dimensión fractal de acuerdo con:

$$\alpha = 2 - f$$

y se espera que las interfaces que presenten un mayor valor de dimensión fractal tengan asociada una mayor área superficial. En la Figuras 13 se muestran las imágenes de dos interfaces diferentes, donde la superficie 1, que a simple vista nos parece que es la más irregular, es la que tiene una mayor dimensión fractal y por tanto una mayor área superficial.

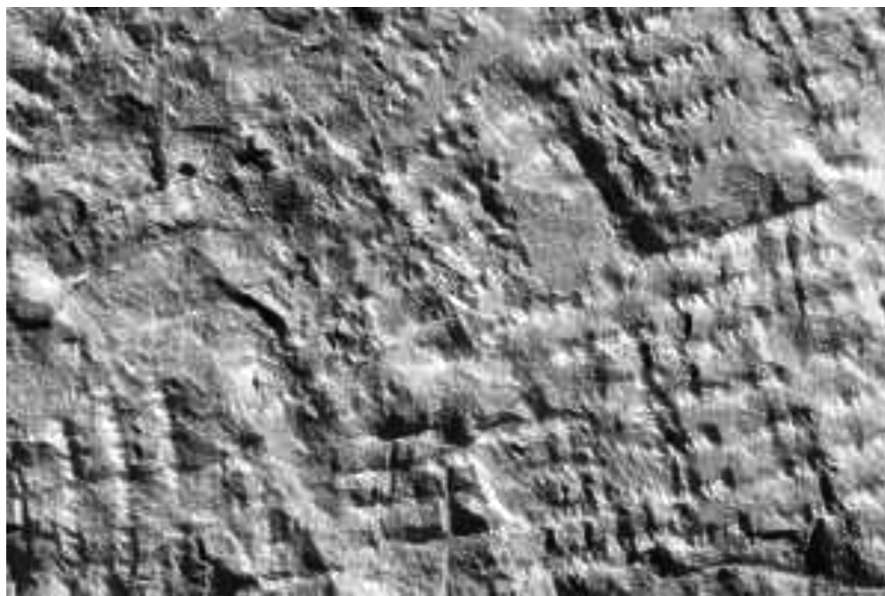


Figura 13.a. Superficie 1



Figura 13.b. Superficie 2

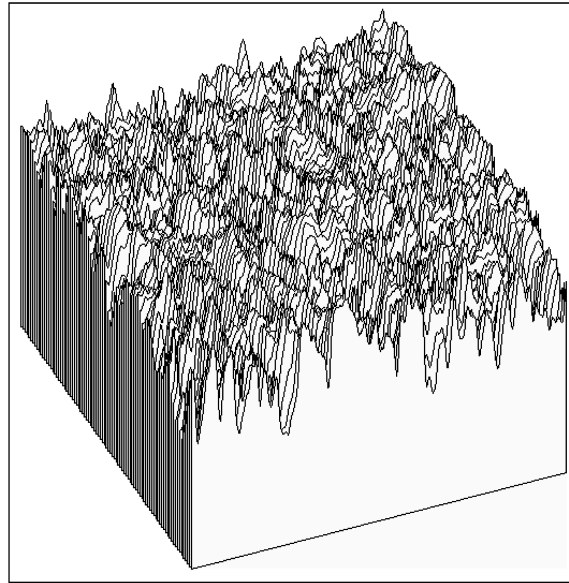


Figura 13.c. Perfil de alturas de la superficie 1 en tres dimensiones

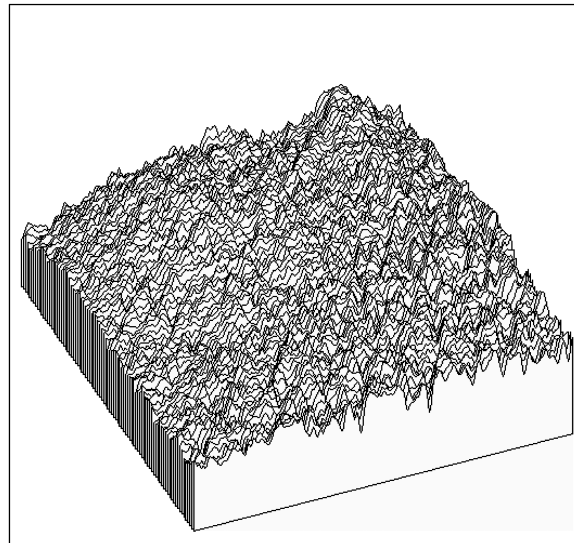


Figura 13.d. Perfil de alturas de la superficie 2 en tres dimensiones

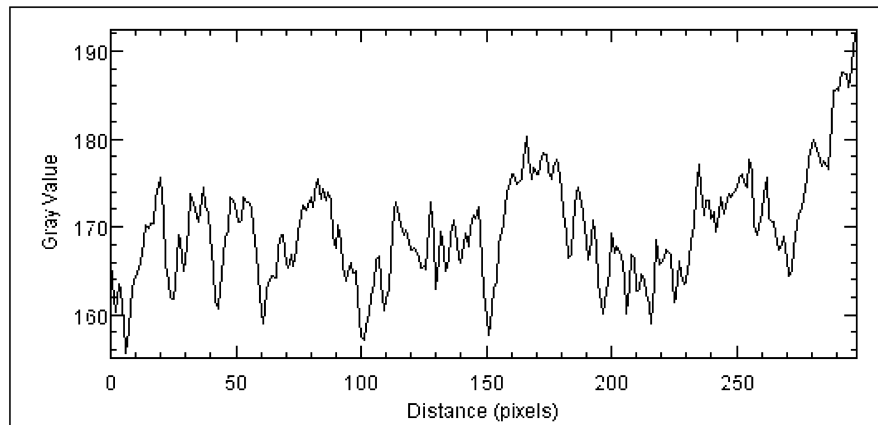


Figura 13.e. Perfil promedio de alturas en la superficie 1

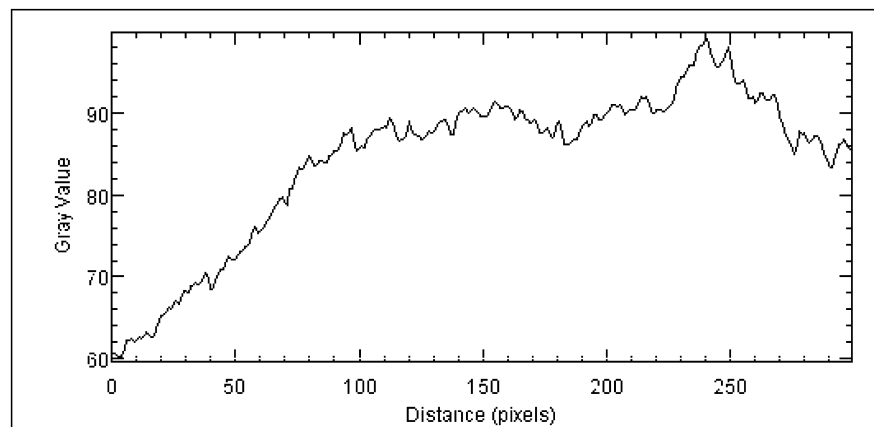


Figura 13.f. Perfil promedio de alturas en la superficie 2

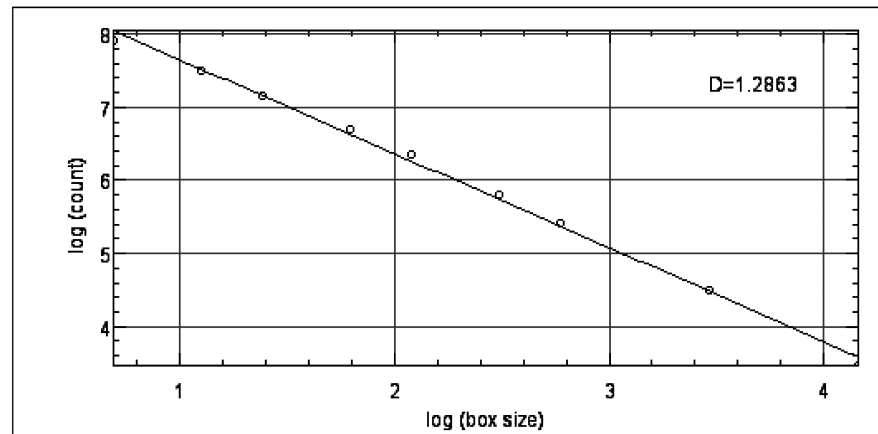


Figura 13.g. Dimensión fractal correspondiente a la superficie 1

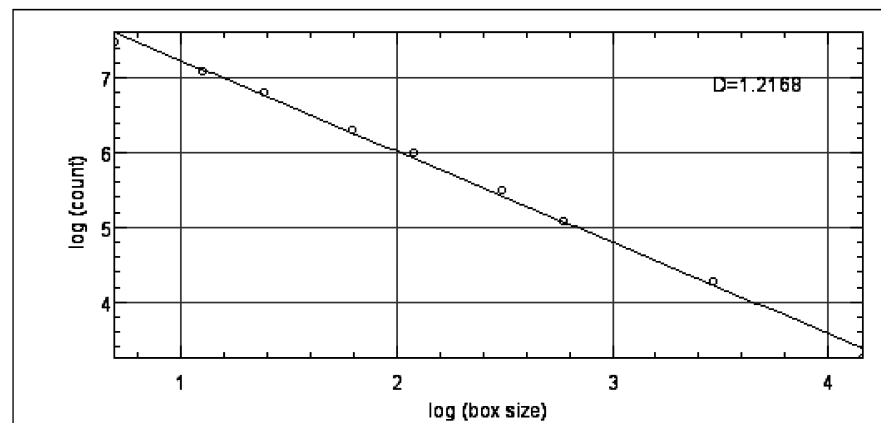


Figura 13.h. Dimensión fractal correspondiente a la superficie 2

Capítulo

7

Ejemplo de aplicación de la
geometría fractal y métodos estocásticos



Problema. Explicar la dependencia existente entre la dimensión fractal de los agregados cristalinos que se forman en 2D con respecto a la concentración y a la temperatura.

Hipótesis: La morfogénesis de los agregados cristalinos que se forman en 2D son un resultado de los procesos aleatorios de disolución y cristalización que ocurren a nivel de las moléculas individuales, de tal forma que el patrón formado es un efecto de las fluctuaciones internas que tienen lugar en el sistema.

Objetivos: Obtener un modelo mesoscópico que describa el proceso de cristalización y ajustar este modelo a los resultados experimentales para estimar la dinámica del proceso de cristalización a partir de la dimensión fractal que muestran los patrones formados. Ajustar el modelo propuesto a los resultados experimentales observados.

7.1. Obtención del modelo Mesoscópico

Para obtener un modelo mesoscópico que describa la formación de los patrones formados durante el proceso de cristalización se establecieron las siguientes suposiciones:

1. La cristalización ocurre en 2D, donde el área del sistema se divide en N sitios totales de área a_N .
2. Los procesos de cristalización y disolución que ocurren a escala microscópica tienen lugar con una determinada probabilidad de transición por unidad de tiempo.
3. La probabilidad se visualiza desde el punto de vista del conjunto y se identifica con la fracción de área total de la superficie que se encuentra ocupada por los cristales.

4. La variable microscópica que describe al sistema es el número de moléculas o agregados moleculares que forman los cristales.
5. La morfología de los cristales formados es demasiado compleja para poder describirse a través de la geometría euclidiana, siendo preferible el empleo de la geometría fractal. De esta manera, la variable macroscópica observada se identifica con la dimensión fractal f del patrón observado, de tal forma que:

$$1 \quad \Theta \approx l^f$$

donde Θ es la cantidad total de cristales presente en el sistema y l es la distancia existente entre dos puntos espaciales del sistema.

6. La probabilidad de transición por unidad de tiempo de que la cantidad de moléculas H que componen el cristal se incremente en 1 depende de la interacción de las moléculas disueltas n_d con los sitios libres n_l , de tal forma que:

$$2 \quad W_{H+1/H} = \frac{k}{N} n_d n_l$$

donde k (t^{-1}) es la constante de velocidad de cristalización, la cual depende de la velocidad de difusión de las moléculas en el medio. Si se considera que n_d se puede representar como la diferencia entre el número total de moléculas de la especie que cristaliza C presentes en el sistema y la cantidad de moléculas cristalizadas H , y que el número de sitios libres n_l es la diferencia entre el número de sitios totales N y la cantidad de moléculas que componen al cristal en 2D, entonces la probabilidad de transición por unidad de tiempo $W_{H+1/H}$ se escribe:

$$3 \quad W_{H+1/H} = \frac{k}{N} (C - H)(N - H)$$

7. La probabilidad de transición por unidad de tiempo $W_{H-1/H}$ de que el número de moléculas cristalizadas disminuya en 1 debido a la disolución se asume:

$$W_{H-1/H} = gH \quad 4$$

donde g (t^{-1}) es la constante de velocidad de disolución.

Definiendo $P(H,t)$ como la probabilidad de que en el tiempo t el número total de moléculas cristalizadas sea igual a H y tomando en cuenta las probabilidades de transición por unidad de tiempo asumidas, la ecuación maestra que describe el comportamiento de $P(H,t)$ se escribe:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(H,t)}{\partial t} &= (\mathbf{E}^{-1} - 1) \frac{k}{N} (C - H)(N - H)P(H,t) \\ &\quad + (\mathbf{E}^{+1} - 1)gHP(H,t) \\ P(H_0, 0) &= 1 \end{aligned} \quad 5$$

La ecuación maestra (5) es no lineal con respecto a las probabilidades de transición por unidad de tiempo, por lo que no tiene solución analítica explícita. Para obtener una solución analítica aproximada se va a suponer, razonablemente, que el cambio ΔH que tiene lugar en el sistema cuando ocurre un proceso a escala molecular es despreciable en comparación H , de tal forma que H puede considerarse como una variable continua. Esta suposición permite expresar el operador paso que aparece en la ecuación maestra en forma diferencial:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^{-1} &= 1 - \frac{\partial}{\partial H} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial H^2} \\ \mathbf{E}^{+1} &= 1 + \frac{\partial}{\partial H} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial H^2} \end{aligned} \quad 6$$

Sustituyendo (6) en (5) y agrupando convenientemente se obtiene la ecuación de Fokker Planck:

$$7 \quad \frac{\partial P(H,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial H} \left(\frac{k}{N} (C-H)(N-H) - gHP \right) P(H,t) \\ + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial H^2} \left(\frac{k}{N} (C-H)(N-H) + gH \right) P(H,t)$$

Definiendo las variables adimensionales:

$$8 \quad \rho = \alpha \frac{H}{N} \\ \alpha = \frac{a_H}{a_N}$$

donde a_H es el área ocupada por una molécula cristalizada, y se toma en cuenta que:

$$9 \quad P(H,t) \partial H = P(\rho,t) \partial \rho$$

entonces es posible expresar la ecuación (7) en función de ρ , que es una variable estocástica que representa la fracción del área cubierta por los cristales:

$$10 \quad \frac{\partial P(\rho,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \rho} (K(\psi - \rho)(\alpha - \rho) - g\rho) P(\rho,t) \\ + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\Omega} \right) \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} (K(\psi - \rho)(\alpha - \rho) + g\rho) P(\rho,t)$$

donde:

$$\psi = \frac{Ca_H}{Na_N} \quad 11$$

$$K = \frac{k}{\alpha}$$

$$\Omega = \frac{N}{\alpha}$$

En estado estacionario, o en las proximidades de este, la distribución de probabilidad puede considerarse normal o gaussiana, de tal modo que para el valor esperado de ρ :

$$\begin{aligned} \frac{d\langle\rho\rangle}{dt} &= K(\psi - \langle\rho\rangle)(\alpha - \langle\rho\rangle) - g\langle\rho\rangle \quad 12 \\ \langle\rho\rangle_{t=0} &= \rho_0 \end{aligned}$$

para la varianza:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{dt} &= 2\beta\sigma + \frac{1}{\Omega}(K(\psi - \langle\rho\rangle)(\alpha - \langle\rho\rangle) + g\langle\rho\rangle) \quad 13 \\ \sigma_{t=0} &= 0 \end{aligned}$$

donde:

$$\beta = \frac{d(K(\psi - \langle\rho\rangle)(\alpha - \langle\rho\rangle) - g\langle\rho\rangle)}{d\langle\rho\rangle} \quad 14$$

Y para la función de probabilidad:

$$P(\rho) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{(\rho - \langle\rho\rangle)^2}{2\sigma}\right) \quad 15$$

Si la probabilidad se visualiza desde el punto de vista del conjunto, entonces la densidad Φ de sustancia que existe en el sistema se identifica con el valor esperado de la probabilidad, de tal forma que:

$$\begin{aligned}
 16 \quad \phi &= \int P(\rho)P(\rho)d\rho \\
 &= \langle P(\rho) \rangle \\
 &= G \frac{1}{\sqrt[2]{\sigma}}
 \end{aligned}$$

Siendo G constante.

Si el sistema se observa en la escala mesoscópica donde $\Omega \rightarrow l^2$. $\rho = l^2$ representa la longitud característica de una entidad individual, la magnitud de las fluctuaciones internas es comparable al valor esperado. Si es expresada Φ como una función de potencia de l :

$$17 \quad \phi \sim l^{-\nu}$$

donde:

$$18 \quad \nu = \lim_{l \rightarrow 1} \left(\frac{d \ln \left((\sigma(l^2))^{-0.5} \right)}{dl} \right) \left(\frac{d \ln l}{dl} \right)^{-1}$$

Y se toma en consideración la definición de dimensión fractal de capacidad entonces:

$$\begin{aligned}
 19 \quad \Phi &\sim \phi l^2 \\
 &\sim l^f
 \end{aligned}$$

De tal manera que la dimensión fractal se puede estimar a partir de la relación:

$$20 \quad f = 2 + \nu$$

A partir del formalismo propuesto es posible obtener diferentes modelos que permiten relacionar la dimensión fractal de las estructuras cristalinas observadas con un parámetro que se relaciona con la dinámica de su formación. En estado estacionario la varianza está dada por:

$$\sigma = \frac{1}{\Omega} \frac{g\rho + K(\alpha - \rho)(\psi - \rho)}{2g + 2K\alpha + 2K\psi - 4K\rho} \quad 21$$

En la escala mesoscópica $\rho=l^2$ de tal forma que la ec. (21) puede ser reescrita como:

$$\sigma = \frac{1}{\Omega} \frac{g(l^2) + K(\alpha - (l^2))(\psi - (l^2))}{2g + 2K\alpha + 2K\psi - 4K(l^2)} \quad 22$$

De tal forma que a partir de las ecuaciones (18) y (20) se obtiene:

$$f = 2 + \lim_{l \rightarrow 1} \left(\frac{d \ln \left((\sigma(l^2))^{-0.5} \right)}{dl} \right) \left(\frac{d \ln l}{dl} \right)^{-1} \quad 23$$

$$f = 2 - \frac{(\psi(2-\psi) - (\alpha-1)^2 - 1)a^2 + 2a + 1}{(\alpha^2(\psi-1) + \psi^2(\alpha-1) + \psi(3-4\alpha) + 3\alpha - 2)a^2 + (\alpha\psi - 1)a + 1}$$

donde:

$$a = \frac{K}{g} \quad 24$$

a representa el cociente entre la constante de velocidad de cristalización y la constante de velocidad de disolución y Ψ es un parámetro que se identifica con la concentración total de la sustancia que cristaliza.

La ecuación obtenida es demasiado complicada desde el punto de vista matemático para su ajuste a datos experimentales observados, siendo conveniente tomar en cuenta determinadas consideraciones que la simplifiquen. En este caso se obtienen los modelos teóricos que se muestran en la Tabla 1:

Consideración establecida	Modelo
$\alpha = 1$	$f = 2 - \frac{(1-a^2(\psi-1)^2+2a)}{a(\psi-1)+1}$
$\alpha \gg \rho, \alpha = 1$	$f = 2 - \frac{1-a}{a(\psi-1)+1}$
$\psi \gg \rho, \alpha = 1$	$f = a\psi + 1$
$\psi \gg \rho, \psi \gg \rho, \alpha = 1$	$f = 2 - \frac{1}{a\psi+1}$

Tabla 1. Modelos teóricos para estimar la dimensión fractal

El modelo que se seleccione dependerá de la capacidad de descripción del mismo a los resultados experimentales observados

Introducción a los métodos estocásticos y análisis fractal
de Edgardo J. Suárez-Domínguez, Víctor M. García-Izaguirre,
Yolanda G. Aranda-Jiménez y Elena F. Izquierdo-Kulich, publicado por la
Universidad Autónoma de Tamaulipas y Colofón,
se terminó en enero de 2021 en los talleres de Litográfica Ingramex, S.A.
de C.V. Centeno 162-1, Col. Granjas Esmeralda, Iztapalapa,
Ciudad de México. El tiraje consta de 350 ejemplares. El cuidado
editorial estuvo a cargo del Consejo de Publicaciones UAT.

