FÍSICA Y COMPUTACIÓN



ÁNGEL SÁNCHEZ

Se pueden enviar contribuciones a esta sección siguiendo el procedimiento habitual de REF o bien directamente a anxo@math.uc3m.es en formato LaTeX, PostScrip o PDF.

Uno de los problemas donde la aportación del ordenador a la física es más relevante es el de los efectos del ruido o desorden. El ordenador ha permitido descubrir que, contra lo que uno pudiera pensar, el ruido tiene muchas veces efectos constructivos, induciendo orden o facilitando la aparición de estructuras y patrones. De ello nos hablará Raúl

Toral en un artículo próximo, pero dada la importancia y generalidad del tema, en este número nos introduce en los conceptos básicos del estudio físico-matemático de sistemas desordenados o con ruido. Espero que esta pequeña introducción, además de hacernos apreciar las sutilezas y el interés de esos nuevos fenómenos, sea de utilidad para muchos lectores que

querrían comenzar el estudio de las influencias ruidosas en sus trabajos. Por ello, completaremos este resumen trayendo a esta sección su complemento metodológico: el problema de la generación de números aleatorios por ordenador, sobre la que nos hablarán en el próximo número Santos Bravo y el propio Raúl Toral. http://gisc.uc3m.es/fisica y computacion

Ruido, más ruido, por favor

Napoleón solía afirmar que "la música es el menos desagradable de los ruidos". Sin compartir el escaso interés musical del emperador francés, sí que tenemos que admitir que el "ruido" es, en general y como algunas músicas, considerado algo desagradable que conviene evitar. Contraponemos la molestia del ensordecedor tráfico de una ciudad con la tranquilidad del murmullo en el campo, el sonido emitido por un martillo neumático con la armonía de una obra musical, o la algarabía de una reunión multidudinaria con una lectura de poemas. Quizá sorprenda saber que en física (y no me estoy refiriendo a la ciencia de la acústica) es común hablar de "ruido". Sorprenderá menos, dada la introducción, saber que el ruido en física, como en nuestras ciudades, tiene también, en general, unas connotaciones negativas. En este artículo explicaré brevemente en qué situaciones físicas aparece dicho ruido y cómo el uso de ordenadores nos ha ayudado grandemente en la comprensión de fenómenos ruidosos. En un artículo posterior discutiré algunos resultados recientes en los que la presencia de ruido es, quizá paradójicamente, necesaria para la creación de un cierto grado de orden en un sistema físico.

En la descripción de un sistema macroscópico es imposible incluir todos sus grados de libertad. Uno de los ejemplos más reiterados, y que ha pasado a formar parte de los libros de texto, es el de la llamada partícula

RAÚL TORAL

browniana [1]. Esta no es más que una pequeña (típicamente de tamaño inferior a una micra) partícula que al estar inmersa en un fluido sigue una trayectoria altamente irregular. Una descripción completa de la dinámica de la partícula browniana requeriría conocer con toda exactitud el efecto que sobre ella ejercen las innumerables moléculas del fluido, lo que requeriría a su vez conocer las posiciones y velocidades de todas esas moléculas. Una tarea claramente imposible. En una descripción puramente macroscópica, tipo fuerza = masa × aceleración, incluiríamos el efecto global de esas moléculas como un único término dando la fuerza promedio ejercida por el fluido sobre la partícula browniana. La experiencia nos dice que ese término es disipativo y puede, en primera aproximación, expresarse mediante una fuerza proporcional a la velocidad, $-\gamma$ v. Un análisis más detallado nos daría la ley de Stokes para el coeficiente $\gamma=6\pi a\eta$ siendo η la viscosidad del fluido y a el radio de la, supuestamente esférica, partícula. Esta descripción macroscópica resulta ser claramente incompleta ya que predice que la partícula acabará en reposo, en contradicción con los experimentos con partículas pequeñas.

Un paso intermedio entre la imposibilidad de considerar el movimiento detallado de las moléculas de fluido y la descripción mediante una única fuerza de resistencia viscosa consiste en incluir en las ecuaciones del movimiento un término de fuerza adicional, $\xi(t)$, de naturaleza aleatoria. Las ecuaciones para la evolución de la posición y la velocidad de la partícula browniana son:

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}$$

$$m\dot{\mathbf{v}} = \mathbf{F} - \gamma \mathbf{v} + \mathbf{\xi}(t) \tag{1}$$

Donde hemos incluido el efecto de una fuerza externa F pensando, por ejemplo, en el potencial gravitatorio o en un campo eléctrico actuando sobre una partícula cargada. El que $\xi(t)$ = $(\xi_r(t), \xi_v(t), \xi_z(t))$ sea de naturaleza aleatoria quiere decir que no intentamos especificar completamente $\xi_i(t)$, i = x, y, z, sino que nos conformamos con dar la probabilidad de que la función $\xi_i(t)$ tome un determinado valor en el tiempo t. En términos matemáticos, se dice que $\xi_i(t)$ es un *proceso estocástico*. En el lenguaje usual en física, $\xi_i(t)$ es un término de ruido. Al no conocer $\xi_i(t)$ no podemos resolver las anteriores ecuaciones para la posición r de la partícula browniana y, a lo más que podemos aspirar es a dar la probabilidad de que $\mathbf{r}(t)$ tenga un valor determinado. Es decir, que $\mathbf{r}(t)$ se ha convertido también, en nuestra descripción, en un proceso estocástico.

El ingrediente esencial para completar la descripción de la dinámica de la partícula browniana en términos del ruido es dar las propiedades estadísticas del mismo. En general, y de acuerdo con la idea motriz al introducir los

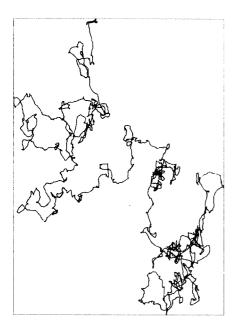


Figura 1. Trayectoria para una partícula browniana en el plano X-Y obtenida por integración de las ecuaciones ??

términos de ruido, no se pretende deducir a partir de un análisis detallado de los movimientos de las partículas del fluido las propiedades estadísticas de $\xi(t)$. Utilizando el que $\xi(t)$ tiene su origen en el movimiento de muchísimas moléculas del fluido e, invocando de manera vaga la ley de los grandes números [2], se supone que $\xi_i(t)$ tiene una distribución de probabilidad gaussiana, independiente para cada dirección espacial i. En otros problemas físicos, el ruido puede tener una distribución de Poisson, o exponencial, o dicotómica, etc. Al ser una distribución gaussiana, queda perfectamente determinada si damos su valor medio $\langle \xi_i(t) \rangle$ y las correlaciones $\langle \xi_i(t) \xi_i(t') \rangle$. Como $\xi_i(t)$ representa la parte aleatoria de la fuerza ejercida sobre la partícula browniana, suponemos que su valor medio es cero y que las fuerzas en diferentes direcciones espaciales están descorrelacionadas. Finalmente, por invariancia bajo traslaciones temporales, las correlaciones serán únicamente función de la diferencia de tiempos: $\langle \xi_i(t) \xi_i(t') \rangle = \delta_{ii} C(t-t').$

Falta ahora por especificar la función de correlaciones C(t-t') que, de manera intuitiva, representa la memoria que la fuerza estocástica en t tiene del tiempo t'. Esto ha de ser una función decreciente que se suele aproximar por una exponencial

$$C(t - t') = \frac{\varepsilon}{2\tau} e^{-|t - t'|/\tau}$$
 (2)

A τ se le llama el tiempo de correlación del ruido y ε es la intensidad del ruido. Es usual que el tiempo de correlación τ sea mucho menor que las escalas de observación experimental típicas. Así, en el caso de la partícula browniana, la escala de τ es del orden de 10^{-8} s, que es del orden del tiempo de las colisiones atómicas, mientras que una observación puede durar del orden de 10^{-2} s o más. En estas condiciones, es usual aproximar la función de correlación por su límite cuando $\tau \to 0$ que no es más que función delta de Dirac: $C(t-t') = \varepsilon \, \delta(t-t')$.

A un ruido con estas correlaciones se le llama *ruido blanco*, mientras que si no podemos despreciar el tiempo de correlación finito del ruido, se habla de *ruido de color*. Estos nombres hacen referencia a que la transformada de Fourier de la función de correlación de un ruido blanco es una constante en el espacio de Fourier de frecuencias, mientras que la correspondiente transformada en el caso de ruido de color favorece una determinada frecuencia, la correspondiente al "color" del ruido.

¿De qué depende la intensidad del ruido? Claramente, cuanto mayor sea la agitación de las moléculas del fluido, mayor será su efecto sobre la partícula browniana y mayor deberá ser la intensidad ε. Es claro que este argumento lleva a que ε debe ser una función creciente de la temperatura T del fluido. En última instancia, es la agitación térmica de las moléculas del fluido la que produce el movimiento desordenado de la partícula browniana. Este análisis se ve confirmado si "resolvemos" las anteriores ecuaciones de movimiento, lo que se puede hacer en este caso sencillo por tratarse de ecuaciones lineales. El "resolver" las ecuaciones, como se ha dicho con anterioridad, no puede dar las funciones detalladas $\mathbf{r}(t)$ y $\mathbf{v}(t)$ y a lo más que puede aspirar es a dar las propiedades estadísticas de $\mathbf{r}(t)$ y $\mathbf{v}(t)$. El análisis de las anteriores ecuaciones lineales con ruido blanco lleva a que tanto $\mathbf{r}(t)$ como $\mathbf{v}(t)$ son variables aleatorias gaussianas de media cero y cuya varianza, salvo términos transitorios que son despreciables después de un tiempo $o(m/\gamma)$, es

$$\langle r(t)^2 \rangle = \frac{3\varepsilon}{\gamma^2}, \ \langle v(t)^2 \rangle = \frac{3\varepsilon}{2m\gamma}$$
 (3)

Si suponemos que la partícula está en equilibrio térmico con el fluido, e invocando el teorema de equipartición de la energía, sabemos que la energía cinética media es $< m\mathbf{v}^2/2 > = 3/2 k_B T$, de donde obtenemos $\varepsilon=2\gamma k_BT$. De esta manera deducimos que la partícula browniana efectúa un movimiento difusivo con un desplazamiento cuadrático $\langle \mathbf{r}(t)^2 \rangle = D t$, con una constante de difusión $D=6k_B T/\gamma$, un resultado obtenido por primera vez por Einstein por otros métodos en su célebre artículo sobre el movimiento browniano publicado en su "año milagroso" de 1905 [3].

Las ecuaciones para la posición y la velocidad de la partícula browniana son un caso particular de las llamadas *ecuaciones de Langevin*, cuya forma general para un conjunto de n variables $x_1,...,x_n$ es:

$$\dot{x}_j = F_i + \sum_{j=1}^n G_{ij} \, \xi_j(t)$$
 (4)

donde $F_i(x_1,...,x_n)$ y $G_{ij}(x_1,...,x_n)$ son funciones dadas de las variables del problema y los términos de ruido $\xi(t)$ son procesos estocásticos gaussianos de media cero y correlaciones

$$\langle \xi_i(t)\xi_j(t')\rangle = \varepsilon \delta_{ij}\delta(t-t')$$
 (5)

Desde el punto de vista formal, es usual distinguir los casos de *ruido aditivo* y *ruido multiplicativo* según que las funciones G_{ij} sean constantes o no, respectivamente.

Las ecuaciones de Langevin aparecen en innumerables campos y en versiones diferentes. En algunos casos se puede deducir la forma de las ecuaciones así como las correlaciones del ruido (como en el caso de la partícula browniana, donde hemos deducido $\varepsilon=2\gamma k_BT$), pero en otros casos se postula que las ecuaciones tienen la forma (4-5), con una intensidad de ruido que se ajusta para obtener los resultados deseados. Un caso particularmente interesante es el del ruido térmico en circuitos eléctricos, ruido que tiene su origen en la agitación térmica de los electrones en las resistencias y conductores del circuito. Este ruido térmico, del que se han ocupado intensamente los ingenieros, produce unos elementos aleatorios en las tensiones y corrientes de todo circuito eléctrico que en el caso de altavoces de audio se manifiestan en forma de molestos ruidos parásitos. De aquí el origen de la palabra "ruido" aplicada a estos términos de las ecuaciones.

Otra situación en la que se incluyen términos de ruido en las ecuaciones es el de la emisión espontánea de fotones en un láser. La emisión espontánea, por su propia definición, no se puede prever y una opción es modelarla mediante unos términos estocásticos en unas ecuaciones de Langevin. En una versión de esas ecuaciones, se consideran ecuaciones para el campo eléctrico E dentro de la cavidad láser y para la inversión de población N. A las ecuaciones de evolución se les añaden términos de ruido cuya intensidad es proporcional a la inversión de población N. Se han utilizado también ecuaciones de Langevin para describir el movimiento de corrientes de agua en los océanos. En este caso, el ruido tiene su origen, entre otras fuentes, en los erráticos vientos que actúan sobre la capa superficial del agua. Finalmente, mencionaré que se han considerado también términos de ruido en sistemas biológicos. Entre ellos, cabe destacar que se han usado ecuaciones de Langevin para modelar células nerviosas que están sometidas a una serie de impulsos externos entre los que cabe identificar componentes deterministas y componentes aleatorias. Un ejemplo concreto es el de las terminaciones nerviosas de un tipo de langosta que se activan mediante las corrientes del agua que la rodea. Veremos en un próximo artículo cómo la capacidad sensorial de la langosta se ve incrementada en presencia de términos ruidosos en dichas corrien-

Es conveniente distinguir entre ruido interno y ruido externo. Es ruido interno aquél que tiene su origen en la dinámica microscópica interna del sistema (como la agitación térmica de los electrones en un conductor). En general, si el ruido es interno, se puede suponer que su escala temporal es mucho menor que las escalas típicas de observación y la aproximación de ruido blanco está justificada. El ruido externo quiere reflejar la influencia de términos ajenos a la dinámica de un sistema determinista, como la de los erráti-

cos vientos en el modelo de circulación oceánica. En muchas ocasiones el ruido externo puede ser producido por el experimentador con unas propiedades adecuadas. En este caso de ruido externo es frecuente que los tiempos de correlación del ruido no puedan ser despreciados y tener que considerar un ruido de color, en vez de la aproximación de ruido blanco.

A los que les quede todavía alguna duda sobre la existencia real del ruido y de su utilidad en la descripción dinámica de muchos sistemas, se les puede despejar si saben que Hewlett-Packard comercializa unos generadores de corriente que producen diversos tipos de tensiones: sinusoidal, diente de sierra, etc. Pues bien, una de la opciones dice "noise" y es posible, girando un botón, regular su intensidad. Al menos, adoptando un punto de vista mercantilista, es claro que algo que se compra no puede por menos que existir.

Se ha desarrollado un ingente trabajo por parte de físicos, matemáticos e ingenieros en el tratamiento de ecuaciones diferenciales con términos de ruido y es posible utilizar una gran variedad de métodos analíticos exactos o aproximados para caracterizar la solución del proceso estocástico $x_i(t)$ resultante de resolver una ecuación diferencial con términos de ruido. Es posible con estos métodos obtener las propiedades estadísticas de $x_i(t)$, los valores medios $\langle x_i(t) \rangle$, los momentos $\langle x_i(t)^n \rangle$ o las correlaciones $\langle x_i(t)x_i(t') \rangle$. Sin embargo, lo que estos métodos no pueden hacer es visualizar la trayectoria, dibujar una gráfica de $x_i(t)$. Es aquí donde se hace imprescindible el uso de técnicas numéricas que, necesariamente, requieren el uso de ordenadores.

La dificultad en generar una trayectoria consiste en que el término de ruido, $x_i(t)$, es una función definida a través de sus propiedades estadísticas y no existe, en general, una fórmula analítica explícita a la que podamos aplicar las técnicas usuales de resolución de ecuaciones diferenciales [4].

Podemos resumir diciendo que la generación de trayectorias requiere de técnicas específicas. No es posible integrar una ecuación de Langevin usando los métodos usuales, Euler, Runge-Kutta, predictores-correctores, etc. sin ninguna modificación.

Existe una vasta literatura sobre la resolución numérica de ecuaciones de Langevin y no es posible aquí explicar en detalle los diferentes algoritmos y su validez [5]. Sin embargo, no queremos dejar de explicar las dificultades básicas que uno encuentra, y dar la forma del "algoritmo mínimo" para integrar una ecuación de Langevin de una variable con ruido blanco

$$\dot{x} = F(x) + G(x)\xi(t) \tag{6}$$

de manera que el lector interesado pueda usarlo para generar trayectorias y reproducir, si así lo desea, algunas de las trayectorias que mostraremos con posterioridad. La dificultad básica al usar, por ejemplo, el sencillo algoritmo de Euler con un paso de integración h: $x(t+h) = x(t) + h\bar{x}(t)$, en el caso de ruido blanco, estriba en que $\xi(t)$ es una variable gaussiana de varianza infinita (este problema no aparece en el caso de ruido de color donde, sin embargo, tenemos el problema adicional de que el valor de $\xi(t)$ no es independiente de valores anteriores $\xi(t')$ con t' < t). Esta dificultad se puede soslayar utilizando un algoritmo integral $x(t+h) = x(t) + \int_{t}^{t+h}$ $\dot{x}(t')$ dt'. Ahora sí que tiene sentido la integral $\int_{t}^{t+h} \xi(t') dt'$ que es un proceso gaussiano de media cero y varianza ε h. De manera que, al orden más bajo, el efecto del término de ruido es de orden $\sqrt{h}\varepsilon$, la desviación cuadrática media de la integral anterior. Esto contrasta con el orden h de la parte determinista del algoritmo, h F(x(t)). Es por ello que se hace necesario ir a un orden más en el desarrollo de la parte de ruido. Sin entrar en detalles, daré la receta final:

$$x(t+h) = x(t) + hF(x(t)) +$$

$$+\sqrt{h\varepsilon} G(x(t))g(t) +$$

$$+\frac{h\varepsilon}{2} G(x(t)) G'(x(t)) g(t)^{2}$$

$$(7)$$

que se conoce con el nombre de algoritmo de Milshtein. Aquí g(t) es un número aleatorio gaussiano de media cero y varianza uno que se deduce por alguno de los métodos existentes y que se explicarán en el número siguiente. Mediante este algoritmo aplicado a la ecuación para la velocidad \mathbf{v} de una partícula browniana y, a continuación, usando \mathbf{r} $(t+h)=\mathbf{r}(t)+h$ $\mathbf{v}(t)$ es posible generar trayectorias, ver figura 1. Esta figura reproduce perfectamente el

movimiento errático que se puede observar en los experimentos.

Si identificamos errático con desordenado, podemos observar aquí una de las características principales del ruido: la de inducir desorden. En un próximo artículo mostraré que hay situaciones en las que tener la cantidad precisa de ruido puede ayudar a inducir orden o a mejorar la respuesta de un sistema dinámico a un estímulo externo. Un resultado ciertamente inesperado, cuyo estudio detallado no puede llevarse a cabo sin disponer de la importante herramienta que constituyen las simulaciones por ordenador.

Bibliografía

[1] ROBERT BROWN fue un botánico escocés que observó el movimiento errático de

- pequeñas partículas de polen cuando estaban sumergidas en agua. Hay una excelente descripción de sus experimentos en http://www.sciences.demon.co.uk/wbbro wna.htm.
- [2] Una versión de esta ley, el teorema del límite central, afirma que la suma de un gran número de variables aleatorias independientes tiende a una distribución gaussiana. Ver, por ejemplo: W. Feller, Introducción a la teoría de las probabilidades, ed. Limusa.
- [3] Hay traducción castellana de los famosos artículos de Einstein, Einstein 1905: un año milagroso, J. STACHEL (ed.), editoral Crítica, Barcelona (2001).
- [4] Esto no es siempre así. Hay algunas ocasiones en las que la aleatoriedad del término de ruido se manifiesta de manera controlable. Es el caso del llamado ruido dicotómico, que adopta únicamente dos valores ξ(t)=A ó ξ(t)=B alternando entre ellos en intervalos aleatorios de tiempo. Puede ser posible resolver las ecuaciones

- para x(t) usando un valor constante del término de ruido y luego ir alternando soluciones durante los intervalos de tiempo generados de manera aleatoria.
- [5] Un corto artículo de revisión que explica con mayor detalle la forma de los algoritmos principales se puede encontrar en: M. San Miguel, R. Toral, Stochastic effects in physical systems, en el libro Instabilities and nonequilibrium structures, editado por E. Tirapegui, J. Martínez y R. Tiemann, Kluwer Academic 35-130 (2000), disponible también en la página web: http://www.imedea.uib.es/physdept/publications/showpaper_en.php?indice=91.

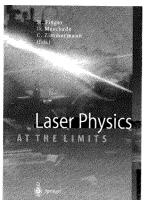
Raúl Toral

está en IMEDEA y en el Dpto de Física, CSIC-VIB Palma de Mallorca

LIBROS Y PUBLICACIONES RECIBIDOS

- Journal of the American Ceramis Society. Revista de la Sociedad Americana de Cerámica. Vol. 84 Num. 11 (Noviembre, 2001).
- Problemas resueltos de Química cuántica y espectroscopia molecular. Juan M. Pérez Martínez, Ángel L. Esteban, Ángel L. Esteban Elum, María Paz Gala-
- che Payá. Publicaciones Universidad de Alicante. Murcia, 2001. 198 pp.
- The European Physical Journal E. Vol. 6 n. 1, September 2001. EDP Sciencies.
- The European Physical Journal E. Vol. 6 n. 2, October 2001. EDP Sciencies.
- The European Physical Journal E. Vol. 6 n. 3, November 2001. EDP Sciencies
- The European Physical Journal B. Vol. 24 n. 1, November I 2001. EDP Sciencies.
- The European Physical Journal B. Vol. 24 n. 2,

- November II 2001. EDP Sciencies.
- The European Physical Journal B. Vol. 24 n. 3, December I 2001. EDP Sciencies.
- The European Physical Journal D. Vol. 17 n. 3, December 2001. EDP Sciencies.



NOVEDAD SPRINGER-VERLAG

Figger, H., Max-Planck-Institut für Quantenoptik, Garching, Germany; Meschede, D., University of Bonn, Germany; Zimmermann, C., University of Tübingen, Germany (Eds.)

Laser Physics at the Limits

2002. XXXIV, 522 pp. 245 figs., 9 tabs. Hardcover 3-540-42418-0

This book contains contributions written by the world-leading scientists in high-resolution laser spectroscopy, quantum optics and laser physics. Emphasis is placed on precision related to results in a variety of fields, such as atomic clocks, frequency standards, and the measurement of physical constants in atomic physics. Furthermore, illustrations and engineering applications of the fundamentals of quantum mechanics are widely covered. It has contributions by Nobel prize winners Norman F. Ramsey, Steven Chu, and Carl E. Wieman and is dedicated to Theodor W. Hänsch on the occasion of his 60th birthday

Disponible en

AULA DOCUMENTAL DE INVESTIGACIÓN

C/ Martín de los Heros, 66 28008 Madrid Tel 91 542 82 82 - Fax 91 559 30 60 www.auladoc.com

