

Relación entre el coeficiente de difusión y masa para un sistema de partícula libre mediante el uso del principio de calibre máximo y simulaciones numéricas

Diego González Díaz^{1,2*}

¹Departamento de Física, Universidad Católica del Norte, Antofagasta, Av. Angamos 0610, Chile

²Banco Itaú-Corpbanca, Casilla 80-D, Santiago, Chile

*diego.gonzalez@ucn.cl

Se presenta una derivación de la ecuación de difusión utilizando el principio de máximo calibre y la ecuación de continuidad para un sistema compuesto por caminos recorridos por una partícula libre en un intervalo de tiempo. Al identificar el coeficiente de difusión en la ecuación de difusión obtenida, se muestra que existe una relación de proporcionalidad inversa con respecto a la masa de la partícula, de modo que una masa más alta está relacionada con una difusión más baja, y la masa más baja está conectada con una difusión más alta. Esta relación también se muestra usando simulaciones de Monte Carlo para muestrear el espacio de trayectoria de un sistema de partículas libres, luego usando la ecuación de división de tiempo para obtener la probabilidad de la posición de la partícula para cada tiempo y mostrar el comportamiento de difusión para diferentes masas.

En la teoría cinética [1], la evolución temporal de la densidad de probabilidad para un movimiento browniano se describe mediante una ecuación diferencial parcial llamada ecuación de difusión. En este trabajo se muestra que en un marco de trabajo de Máximo Calibre al restringir la acción clásica de una partícula libre y al utilizar la ecuación de continuidad[2,3] como ecuación fundamental para encontrar las ecuaciones diferenciales parciales seguidas por el sistema, la densidad de probabilidad tiempo dependiente para el sistema será gobernada por la ecuación de difusión. Esta derivación puede ser utilizada como marco de trabajo para simular sistemas dinámicos clásicos utilizando técnicas estadísticas como Monte Carlo Metropolis[4,5]. **Agradecimientos:** El autor agradece al Departamento de Física de la Universidad Católica del Norte por el apoyo constante en investigación y a Itaú-Corpbanca por permitir y facilitar el desarrollo de una carrera científica junto con el desarrollo profesional en la industria.

Referencias

- [1] R. Soto, Kinetic Theory and Transport Phenomena, Oxford University Press (2016)
- [2] D. González and D. Diaz and S. Davis, Continuity equation for probability as a requirement of inference over paths, The Eur. Phys. J. B (2016)
- [3] D. González, S. Davis and G. Gutierrez. Probabilistic Inference for Dynamical Systems J. Entropy (2018).
- [4] D. González and S. Davis and S. Curilef, Solving Equations of Motion by Using Monte Carlo Metropolis: Novel Method Via Random Paths Sampling and the Maximum Caliber Principle, Entropy (2020)
- [5] D. Gonzalez, Relation between diffusion coefficient and mass for a free particle system by using Maximum Caliber principle and numerical simulations, Preprint Revista Chaos (2022)