

Matemáticas

Movimiento Browniano

1. INTRODUCCIÓN HISTÓRICA

El Movimiento Browniano fue descubierto en 1827 por el botánico escocés Robert Brown, cuando estaba empeñado en observar a través del microscopio partículas de polen en suspensión en un líquido. Observó que los granos de polen no permanecían estáticos sino que estaban sometidos a un movimiento zigzageante y errático, de modo que cada uno de ellos se dispersaba en una dirección diferente. Inicialmente Brown atribuyó este comportamiento a que se trataba de células sexuales masculinas vivas; pero no tardó mucho en comprobar que el mismo comportamiento mostraban los granos de polen que llevaban décadas almacenados e, incluso, partículas inorgánicas suficientemente ligeras.

El fenómeno se atribuyó, entonces, a las corrientes de convección térmica del medio; pero la independencia de los movimientos seguidos por partículas próximas, descartó rápidamente esta explicación. Además, en 1865 se mantuvo una suspensión de partículas sellada durante un año entero, sin observarse ninguna disminución de su movimiento.

Observaciones detalladas realizadas a partir de 1860, por Gouy y Exner sobre todo, mostraron que la actividad del movimiento crece al disminuir el tamaño de las partículas, sin que influya su densidad, al aumentar la temperatura o al rebajar la viscosidad del medio; en el sentido de que la partícula se aleja más, en el mismo tiempo, de su posición inicial.

La explicación cualitativa correcta fue sugerida en 1877 por Desaulx: el movimiento de las partículas es debido a los impactos continuos que sufren por parte de las moléculas del medio, sometidas al movimiento térmico en direcciones aleatorias y con velocidades descritas por la distribución de Maxwell. Cualquier partícula suficientemente grande para ser observada al microscopio, pero con inercia suficientemente pequeña, sufre constantes colisiones por parte de las moléculas que la rodean y cada colisión altera su velocidad en una dirección y con un módulo aleatoriamente determinados por la energía y la trayectoria de la molécula que la golpea. Como consecuencia, la trayectoria de la partícula cambia constantemente de dirección y produce el movimiento errático de la partícula.

Cuando se produjo esta explicación, la teoría atómica de la materia y la explicación cinética del calor estaban recién desarrolladas y lejos de ser universalmente aceptadas. De hecho, el movimiento browniano de las partículas en suspensión se propuso como uno de los primeros efectos observables que corroboraban dichas teorías.

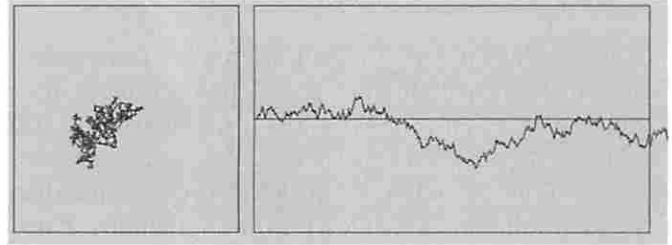


Figura 1. Trayectoria bidimensional y gráfico espaciotiempo de la componente y .

La trayectoria de la partícula a través del microscopio se observa en dos dimensiones, pero no es más que la combinación de dos movimientos idénticos sobre cada uno de los dos ejes, de modo que lo primordial es el análisis del movimiento unidimensional (véase Figura 1). Después, pueden combinarse varios de ellos para estudiar el movimiento browniano en IR^2 , IR^3 o, en IR^n ; aunque existen diferencias sustanciales según el número de dimensiones.

El primer modelo cuantitativo del movimiento browniano fue desarrollado por Einstein en 1905, el año de sus grandes descubrimientos, e independiente y casi simultáneamente por Marian Smoluchowski. Al parecer Einstein no conocía los estudios previos sobre el movimiento browniano y “lo predecía” con su desarrollo mecánico-estadístico. Las conclusiones del modelo eran sustancialmente dos:

- Una de carácter probabilístico: La probabilidad $p(t, x)$ de que cada una de las coordenadas de la partícula se haya incrementado en una cantidad x al cabo de un tiempo t , verifica:

$$\frac{\partial p(t, x)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p(t, x)}{\partial x^2} \quad (1)$$

ecuación de derivadas parciales, conocida como *ecuación del calor* en la que D se denomina el coeficiente de difusión. Como consecuencia, $p(t, x)$ es la densidad de una distribución Normal, de media 0 y desviación típica proporcional a \sqrt{t} ,

$$p(t, x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-x^2/4Dt} \quad (2)$$

- Desde el punto de vista físico, Einstein relacionaba el coeficiente de difusión D con las condiciones físicas del experimento. Concretamente establecía que

$$D = \frac{kT}{m\beta} \quad \text{con} \quad \beta = \frac{6\pi\eta R}{m} \quad (3)$$

donde k es la constante de Boltzman, T la temperatura absoluta, m la masa de la partícula, R su radio y η el coeficiente de viscosidad del medio. D resulta independiente de m y los resultados experimentales de Gouy y Exner quedan explicados.

Las conclusiones de Einstein fueron a su vez corroboradas experimentalmente por el físico francés Jean Baptiste Perrin, entre 1905 y 1911, que consiguió con ello una determinación experimental del número de Avogadro y de la constante de Boltzman, que coincidían con los resultados obtenidos por otros métodos. Estos trabajos, que permitieron a Perrin obtener el Premio Nobel en 1926, confirmaron que la descripción de Einstein del Movimiento Browniano era sustancialmente correcta. Modelos físicos más sofisticados fueron desarrollados posteriormente por físicos de tanto renombre como Fokker, Plank, Ornstein y Uhlenbeck.

Desde el punto de vista matemático, fue Norbert Wiener, conocido sobre todo como padre de la Cibernética, el que inició en 1918 el estudio del movimiento browniano que, en buena parte, originó el desarrollo de la teoría de los procesos estocásticos. Bajo la influencia de Wiener, de Andrei Kolmogorov, de Paul Lévy, y muchos otros la teoría se desarrolló rápidamente.

En cualquier caso, después de sus inicios, el movimiento browniano fue progresivamente adquiriendo un gran relieve en numerosas áreas de las ciencias puras y aplicadas. Entre estas últimas, cabe citar la electrónica, la ingeniería, la biología y la economía.

El caso de las aplicaciones económicas es curioso. Por una parte, es sorprendente que en 1900 el economista francés Louis Bachelier, en su tesis doctoral *Théorie de la spéculation*, ya propuso un modelo con las características del movimiento browniano para describir las fluctuaciones de los precios de los mercados. Sin embargo, pese a los múltiples desarrollos y aplicaciones de la teoría de procesos estocásticos, en 1970 el estudio de estas cuestiones seguía circunscrito al ámbito científico y académico de las Universidades y los centros de investigación. Sin embargo, en 1973 dos economistas, Fisher Black y Myron Scholes, desarrollaron una técnica de valoración de derivados financieros, explicada con más precisión por Robert Merton, que supuso una verdadera revolución en el mundo bursátil. El problema de la valoración de opciones era un problema pendiente desde antiguo y, como reconocimiento, el premio Nobel de Economía de 1997 fue otorgado a Scholes y Merton (Black había muerto en 1995) por sus trabajos en esta materia, dado su tremendo impacto en la comprensión de las leyes que rigen los mercados financieros.

La metodología de Black-Scholes-Merton se basa en desarrollos teóricos, considerablemente sofisticados, todos los cuales tienen su origen en el movimiento browniano. Como consecuencia el mundo de los analistas de mercados y de las sociedades de inversión han adquirido un repentino y sorprendente interés por las peculiaridades del movimiento browniano y las complejidades del

cálculo diferencial estocástico de Itô, que ha llegado incluso a trascender a los medios de comunicación.

2. EL MODELO MATEMÁTICO

Como tantas veces, los matemáticos tomaron el problema donde lo habían dejado los físicos. Así Wiener formuló el modelo matemático del movimiento browniano como el estudio del movimiento de un punto, cuyas posiciones X_t , en los distintos instantes $t \geq 0$, son aleatorias y cumplen la conclusión fundamental establecida por Einstein:

El desplazamiento $X_t - X_s$, en cualquier intervalo de tiempo (s, t) , tiene distribución Normal $(0, \sigma\sqrt{t-s})$. (véase Figura 2).

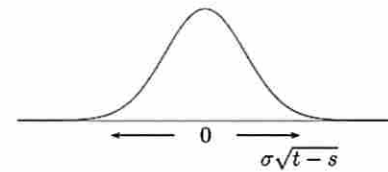


Figura 2.

Más exactamente, siguiendo la costumbre de no dejar implícita ninguna hipótesis, las características que Wiener postuló para regir el movimiento fueron:

- (1) $X_0 = 0$ (es decir, el origen se fija en la posición inicial de la partícula).
- (2) En intervalos de tiempo disjuntos (s_1, t_1) , (s_2, t_2) , ..., (s_n, t_n) , los incrementos de posición: $X_{t_1} - X_{s_1}$, $X_{t_2} - X_{s_2}$, ..., $X_{t_n} - X_{s_n}$ son independientes. (Es decir, que conocer cuál ha sido el movimiento de la partícula en cierto lapso de tiempo, no da ninguna información sobre cuál será su desplazamiento en ningún otro intervalo de tiempo disjunto).
- (3) En cualquier intervalo de tiempo (s, t) el desplazamiento $X_t - X_s$ tiene distribución Normal $(0, \sqrt{t-s})$.

Cabe imaginar que el punto reinicia en cada momento su desplazamiento, a partir de la posición que ocupa, olvidando la trayectoria que lo ha llevado hasta la situación actual y eligiendo su "próxima" posición de acuerdo con una distribución normal. Es fácil entonces conocer la distribución conjunta de la posición que ocupará en cualquier conjunto finito de instantes (de hecho una distribución normal multidimensional). Sin embargo, dado que el tiempo se considera que transcurre de forma continua, no cabe hablar de "próxima" posición y hace falta un requisito de continuidad de la trayectoria, a fin de que ésta quede especificada por su valor en un conjunto numerable de instantes.

De esta forma el modelo matemático se completa con un cuarto postulado que, sin duda, no había preocupado en absoluto a Einstein:

(4) Cada posible trayectoria seguida por el punto móvil es una curva continua.

Este cuarto requisito no sólo no se deduce de los anteriores, sino que surge la preocupación de si será compatible con ellos. La duda fue primero resuelta por el propio Wiener y poco después Paul Lévy proporcionó una forma explícita de construir una trayectoria continua, al azar, cuyas posiciones X_t cumplen los tres postulados previos. Este resultado adopta con frecuencia un enunciado (no atribuible ni a Wiener ni a Lévy) que es de una petulancia casi cómica para cualquiera que no sea matemático, puesto que afirma enfáticamente:

Teorema 1: *El movimiento browniano existe.*

Naturalmente, sólo se pretende decir que las condiciones (1)-(4) son compatibles; y no que el razonamiento lógico pueda sustituir las observaciones de Robert Brown.

3. PROPIEDADES DE LAS TRAYECTORIAS

Todo estudiante de Ciencias ha trabajado en sus primeros cursos con funciones continuas y se las imagina con un trazado suave y a menudo armonioso, sobre las cuales aprendió a determinar sus extremos, sus intervalos de crecimiento y decrecimiento, sus raíces, etc. Por eso, entre las propiedades más sorprendentes del movimiento browniano cabe citar, en primer lugar, el comportamiento asombrosamente “patológico” de sus trayectorias. De momento nos referiremos al caso unidimensional, en el que la partícula se mueve sobre una recta y realiza un recorrido cuya gráfica, en función del tiempo, tiene la apariencia mostrada en la Figura 1.

Un primer resultado, relativo al comportamiento macroscópico del movimiento browniano, afirma que la partícula llegará a alejarse indefinidamente de su posición inicial, tanto en una dirección como en la contraria. El enunciado exacto es:

Teorema 2: *Con seguridad,*

$$\limsup_{t \rightarrow \infty} X_t = +\infty \quad \text{y} \quad \liminf_{t \rightarrow \infty} X_t = -\infty.$$

Así, a largo plazo, la partícula oscila entre $-\infty$ y $+\infty$ y se ve obligada a volver a pasar indefinidamente por cada punto; en particular a regresar sin fin a la posición inicial.

Otra propiedad sencilla, pero que revela el carácter fractal de las trayectorias es que:

Teorema 3: $tX_{1/t}$ es también un movimiento browniano.

Según ello, si invertimos el tiempo, y observamos el comportamiento cada vez más cerca del origen, con una

lente cada vez de más aumentos, observaremos fluctuaciones similares a las que se observan a largo plazo. Naturalmente, el origen no juega ningún papel especial, y el comportamiento es el mismo en cualquier segmento de la trayectoria; o sea que, convenientemente aumentadas, las fluctuaciones en cualquier instante son análogas a las oscilaciones a largo plazo. En particular,

Corolario 1: *Con seguridad, por pequeño que sea $\varepsilon > 0$, es:*

$$\max_{t \leq \varepsilon} X_t > 0 \quad \text{y} \quad \min_{t \leq \varepsilon} X_t < 0.$$

y cada trayectoria corta el eje de abscisas en infinitos puntos de cualquier entorno de $t = 0$. Ello pone de relieve que el conjunto S_0 de ceros de cualquier trayectoria es un conjunto muy peculiar; de hecho, puede establecerse:

Teorema 4: *Con seguridad, S_0 es un conjunto cerrado, no acotado, de longitud cero, sin puntos aislados; es por tanto un conjunto no numerable.*

De longitud cero significa simplemente que el tiempo total que la partícula permanece en el origen es nulo y, por tanto, no contiene ningún intervalo. Sin puntos aislados quiere decir que toda raíz está rodeada por otras a distancia tan pequeña como se quiera; los conjuntos cerrados con esta característica no pueden ser numerables. La existencia de conjuntos de la recta no numerables —es decir, con tantos puntos como un intervalo— pero situados de tal manera que su longitud es cero sólo fue detectada por Cantor a finales del siglo XIX. Sin embargo, cada trayectoria del movimiento browniano construye al azar un conjunto de raíces con tales características. Más aún, cualquier conjunto de nivel S_y en el que la trayectoria toma el valor y es un conjunto con las mismas características que S_0 .

El comportamiento vibratorio del movimiento browniano queda también patente en la siguiente propiedad:

Teorema 5: *Con seguridad, las trayectorias no tienen ningún intervalo en el que sean monótonas y los máximos y mínimos locales, todos ellos estrictos, ocurren en un conjunto numerable y denso de $[0, \infty)$.*

La última afirmación significa que hay extremos en el interior de cualquier intervalo por pequeño que sea. Puestas así las cosas, ya resulta menos sorprendente la conclusión:

Teorema 6: *Con seguridad, las trayectorias no son derivables en ningún punto pues, en cualquier instante t , los cocientes incrementales:*

$$\frac{X_{t+h} - X_t}{h}$$

tienen límite superior $+\infty$ o límite inferior $-\infty$.

Dicho llanamente, en el movimiento browniano no cabe hablar de la velocidad con que se mueve la partícula en ningún instante. Como en el caso anterior, los matemáticos tuvieron que esperar a finales del siglo XIX para que Weierstrass descubriera una función continua sin derivada en ningún punto, como las que traza cualquier partícula sometida al movimiento browniano.¹

Una consecuencia importante del teorema anterior es que las trayectorias no son de variación acotada en ningún intervalo; es decir, ningún segmento de la curva tiene longitud finita. Formalmente ello significa que, para cualquier intervalo temporal $[s, t]$, existe una partición $s = t_0 < t_1 < \dots < t_n = t$ tal que:

$$\sum_{i=1}^n |X_{t_i} - X_{t_{i-1}}|$$

es arbitrariamente grande. Por el contrario, la variación cuadrática:

$$\sum_{i=1}^n |X_{t_i} - X_{t_{i-1}}|^2 \text{ converge a } t - s \tag{4}$$

cuando el radio de la partición tiende a cero. Ello supone otra peculiaridad notable, puesto que la variación cuadrática de cualquier curva suave es nula. Este hecho juega un papel decisivo en el desarrollo del “cálculo integral-diferencial estocástico”.

En vista del corolario 1 —según el cual, toda trayectoria penetra en el semiplano positivo y, también, en el negativo en tiempos arbitrariamente pequeños— cabría esperar que pequeñas alturas x fuese alcanzadas al cabo de muy poco tiempo. Un cálculo ingenioso —mediante el denominado “principio de reflexión”— permite obtener la distribución del tiempo τ_x se tarda en alcanzar cada nivel x . La primera sorpresa es que, por pequeño que sea x el tiempo medio necesario para alcanzarlo es infinito.

Pero además el estudio de cómo evoluciona, sobre cada trayectoria, el tiempo τ_x , a medida que x aumenta, es muy interesante: τ_x crece exclusivamente a saltos, que cabe clasificar por su tamaño, observándose que cada tamaño posible ocurre con una determinada frecuencia precisa; con la propiedad adicional de que los saltos necesarios para subir del nivel x_1 al nivel x_2 son independientes de como se haya producido el crecimiento de 0 a x_1 . Se trata, por tanto, de un proceso de incrementos independientes —lo mismo que el movimiento browniano— pero con distribución de los incrementos no normal y con trayectorias totalmente discontinuas.

Es posible avanzar más en esta dirección, pero los resultados pasan a ser sobre todo cuantitativos y, por

consiguiente, más difíciles de describir con sencillez. Como única ilustración cabe citar la “ley del arco seno” para el movimiento browniano, según la cual:

$$P\{\text{la trayectoria tenga alguna raíz en } (t_1, t_2)\} = 1 - \frac{2}{\pi} \arcsen \sqrt{t_1/t_2}.$$

4. FUNCIONES ARMÓNICAS Y MOVIMIENTO BROWNIANO

Las funciones armónicas —o, en términos físicos, potenciales— son las funciones que verifican la ecuación de Laplace:

$$\Delta u = 0 \tag{5}$$

y se caracterizan, según un resultado clásico de Gauss, por el hecho de que su valor en un punto es el promedio de los valores sobre cualquier esfera centrada en dicho punto:

$$u(x) = \frac{1}{\sigma(\partial B(x, r))} \int_{\partial B(x, r)} u(y) \sigma(dy). \tag{6}$$

donde σ es el área de las regiones de la superficie $\partial B(x, r)$ de la esfera de centro x y radio r .

Existen numerosas relaciones entre el movimiento browniano $W_t = (X_t^1, X_t^2, \dots, X_t^d)$ en \mathbb{R}^d y las funciones armónicas de d variables (véase Figura 3).

La más simple es que desde un punto x fuera de la esfera $B(0, r)$, de centro en el origen y radio r , la probabilidad $P_x(r)$ de alcanzar dicha esfera cumple:

$$P_x(r) = \frac{1}{\sigma(\partial B(x, \varepsilon))} \int_{\partial B(x, \varepsilon)} P_y(r) \sigma(dy);$$

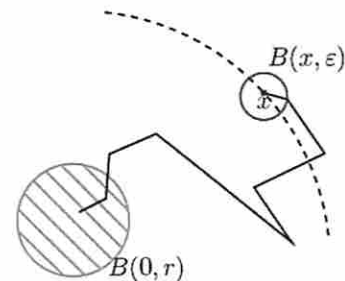


Figura 3.

luego se trata de una función armónica que, además, sólo depende del módulo $\|x\|$.

¹ La ausencia de velocidad es una de las críticas al modelo de Einstein, como descripción del movimiento de una partícula. Para paliarlo Ornstein y Uhlenbeck, teniendo en cuenta la fricción con el medio, desarrollaron un modelo que en intervalos de tiempo finitos se comporta como el movimiento browniano, pero en intervalos de tiempo muy cortos suaviza la trayectoria para que esté definida la velocidad. No obstante, el modelo de Ornstein y Uhlenbeck es una mejora del modelo de Wiener del que depende su propio planteamiento.

Es sabido que, en dimensión $d \geq 3$, las únicas funciones armónicas y radiales son:

$$u(x) = a + \frac{b}{\|x\|^{d-2}}$$

así que basta ajustar las constantes obvias para obtener:

Teorema 7: Si $d \geq 3$, desde $x \notin B(0, r)$, la probabilidad de que el movimiento browniano alcance $B(0, r)$ es:

$$P_x(r) = \frac{r}{\|x\|^{d-2}}$$

Como tal probabilidad es inferior a 1 si $\|x\| > r$, resulta que es nula la probabilidad de que W_t (en 3 o más dimensiones) visite un entorno $B(0, r)$ del origen infinitas veces; así que no hay más remedio que se cumpla:

$$\lim_{t \rightarrow 0} \|W_t\| = \infty.$$

Nótese que cada componente X_i regresa indefinidamente a los alrededores del origen; no obstante, con 3 o más componentes, siempre hay al menos una que toma un valor grande. Por otro lado, si:

$$p(x, t, y) = \frac{1}{2\pi t^{d/2}} e^{-\|x-y\|^2 / 2t}$$

es la densidad de transición del browniano W_t , d -dimensional, es fácil calcular:

$$\int_0^\infty p(x, t, y) dt = \frac{s_d}{\|x-y\|^{d-2}}$$

donde $s_d = 2\pi^{d/2}/\Gamma(d/2)$ es la superficie lateral de la esfera d -dimensional de radio 1. Ello prueba fácilmente que:

Teorema 8: Si $d = 3$, el tiempo medio que W_t pasa en $B(0, r)$, partiendo de x , tiene el valor finito:

$$s_d \int_{B(0,r)} \frac{dy}{\|x-y\|^{d-2}}$$

El caso bidimensional

En \mathbb{R}^2 , como las únicas funciones armónicas y radiales son $a + b \log \|x\|$, el teorema 7 se transforma en:

Teorema 9: Si $d = 2$, desde x con $r < \|x\| < R$, la probabilidad de que W_t alcance $\partial B(0, R)$ antes que $\partial B(0, r)$ es:

$$P_x(r, R) = \frac{\log\|x\| - \log r}{\log R - \log r}$$

Al tender r a cero, la probabilidad de llegar a $\partial B(0, R)$ antes que al origen es 1, es decir que es nula la probabilidad de llegar al origen antes de salir de la bola $B(0, R)$; cuando R tiende a ∞ , resulta que es nula la probabilidad de pasar por el origen. Esto es,

Corolario 2: En dos dimensiones, la probabilidad de que el browniano pase por un punto fijo es nula.

De ahí resulta inmediato que el área de la trayectoria del browniano tiene media nula y, como es no negativa, es nula con seguridad. Sin embargo, $P_x(r, R) \rightarrow 0$ al tender R a infinito; de modo que es nula la probabilidad de no alcanzar nunca $\partial B(0, r)$. Así pues:

Teorema 10: Si $d = 2$, W_t pasa por cualquier abierto del plano y su trayectoria es densa en \mathbb{R}^2 .

A partir de este hecho, puede darse una demostración muy simple del teorema fundamental del álgebra (todo polinomio tiene al menos una raíz compleja).

Tras esta muestra de las aplicaciones de las funciones armónicas al estudio del movimiento browniano, en sentido contrario, éste permite dar una solución “muy simple” del problema de Dirichlet de determinar una función armónica en cierto dominio D a partir de sus valores sobre su frontera:

Teorema 11: Si D es un dominio acotado de \mathbb{R}^d , tal que en cada punto $a \in \partial D$ existe un cono $C_a \subset D^c$ de vértice a , y f es una función continua en ∂D , entonces hay una única función armónica u en D tal que $u(x) \rightarrow f(a)$ cuando $x \in D$ tiende a $a \in \partial D$. La solución se expresa:

$$u(x) = E^x[f(W_\tau)]$$

donde τ es el primer instante en que W_t alcanza ∂D y E^x representa el valor esperado (de $f(W_\tau)$, en este caso) supuesto que W_t se inicia en el punto x .

De hecho, resulta claro que u tiene la propiedad del valor medio (6), de modo que es una función armónica. La condición, debida a Poincaré, relativa al cono $C_a \subset D^c$ garantiza que desde los puntos de la frontera ∂D el browniano W_t abandona inmediatamente D y, por consiguiente, $u(a) = f(a)$ (véase Figura 4).

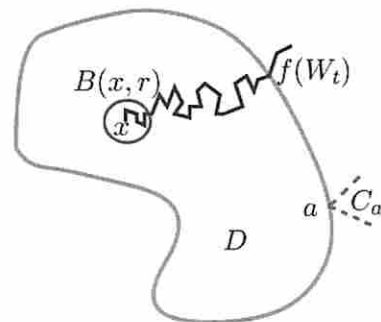


Figura 4.

Pero el razonamiento estocástico muestra que la condición de Poincaré no es la condición precisa. Lo que es

necesario es que se pueda afirmar que un movimiento browniano W_t iniciado en cualquier punto a de la frontera penetra inmediatamente en D^c . En la Figura 5 se muestran puntos frontera "irregulares" y otros que son regulares, a pesar de no cumplir la condición de Poincaré. En el caso en que el dominio D no esté acotado, lo que cambia es que no hay seguridad de que W_t abandone el dominio D ; pero la modificación es sencilla:



Figura 5.

Teorema 12: Si D es un dominio de \mathbb{R}^d cuyos puntos frontera son regulares, y f es una función continua en ∂D , las funciones armónicas u en D , tales que $u(x) \rightarrow f(a)$ cuando $x \in D$ tiende a $a \in \partial D$ son de la forma:

$$u(x) = E^x[f(W_\tau)] + cP^x\{\tau = \infty\}$$

donde c es una constante arbitraria (que pondera la probabilidad de que W_t nunca abandone D).

Generalizaciones

En la misma línea de expresar en términos del movimiento browniano la solución de problemas de ecuaciones en derivadas parciales, el problema de Poisson:

$$-\frac{1}{2}\Delta u = g \quad (7)$$

planteado en un dominio acotado D , con frontera regular sobre la cual u debe anularse, tiene como única solución:

$$u(x) = E^x \left[\int_0^\tau g(W_t) dt \right] \quad (8)$$

donde τ es de nuevo el instante en que W_t sale de D .

En el caso en que los valores sobre la frontera ∂D estén especificados por una función continua f , la solución se expresa:

$$u(x) = E^x \left[f(W_\tau) + \int_0^\tau \rho(W_t) dt \right] \quad (9)$$

En cuanto a la ecuación de Schrödinger de la física cuántica:

$$\left(\frac{1}{2}\Delta + q \right) u = 0 \quad (10)$$

su solución en un dominio D , con la condición de contorno f , se expresa:

$$u(x) = E^x \left[f(W_\tau) \exp \int_0^\tau q(W_s) ds \right] \quad (11)$$

conocido como el funcional de Feynman-Kac.

5. CÁLCULO ESTOCÁSTICO

El inicio del cálculo íntegro diferencial estocástico se inicia cuando K. Itô consigue dar sentido, para un movimiento browniano unidimensional X_t , a integrales del tipo:

$$\int_0^t f'(X_s) dX_s \quad (12)$$

Para destacar la novedad sorprendente que ello supone, recuérdese que, en el caso de ser $g(s)$ una función suave (de variación acotada) se cumple:

$$\int_0^t f'(g(s)) dg(s) = f(g(t)) - f(g(0)) \quad (13)$$

que puede interpretarse como la fórmula que proporciona el sonido resultante $f(g(t))$ cuando un sonido suave $g(s)$ se modifica multiplicando sus incrementos por una función de su intensidad $f'(g(s))$.

En cambio cuando X_s es un ruido browniano, aparece un término adicional en la forma:

$$\int_0^t f'(X_s) dX_s = f(X_t) - f(X_0) - \frac{1}{2} \int_0^t f''(X_s) ds \quad (14)$$

El fenómeno puede explicarse descomponiendo el incremento $f(X_t) - f(X_0)$ a lo largo de una partición del intervalo $[0, t]$ y aplicando el desarrollo de Taylor:

$$\begin{aligned} f(X_t) - f(X_0) &= \sum_{i=1}^n f(X_{t_i}) - f(X_{t_{i-1}}) \\ &= \sum_{i=1}^n f'(X_{t_i})(X_{t_i} - X_{t_{i-1}}) + \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n f''(X_{t_i})(X_{t_i} - X_{t_{i-1}})^2 + \dots \end{aligned}$$

Si X_t tuviese trayectorias suaves, el segundo término tendería a 0 y resultaría una expresión como (13); pero

aquí, el primer sumando converge (en el sentido adecuado) a la integral de Itô, $\int_0^t f'(X_s) dX_s$ y el segundo sumando converge a $1/2 \int_0^t f''(X_s) ds$ (véase (4)), lo cual da lugar a la fórmula (14):

$$f(X_t) - f(X_0) = \int_0^t f'(X_s) dX_s + \frac{1}{2} \int_0^t f''(X_s) ds \quad (15)$$

conocida como "fórmula de Itô" y que, con más frecuencia, se escribe en forma diferencial:

$$df(X_t) = f'(X_t) dX_t + \frac{1}{2} f''(X_t) dt. \quad (16)$$

Entre sus diversas generalizaciones, la más simple es la versión no autónoma:

$$df(t, X_t) = \left[f_t'(t, X_t) + \frac{1}{2} f_{xx}''(t, X_t) \right] dt + f_x'(t, X_t) dX_t. \quad (17)$$

Ecuaciones diferenciales estocásticas

Las ecuaciones diferenciales ordinarias permiten el estudio de sistemas que evolucionan regidos por una relación del tipo:

$$dY_t = b(t, Y_t) dt \quad (18)$$

que expresa que la variación de Y_t en $(t, t + dt)$ es una función $b(t, Y_t) dt$ de su valor.

Sin embargo, es frecuente que la dinámica del sistema esté sometida a perturbaciones aleatorias, que normalmente tienen las características propias del movimiento browniano (independencia de los ruidos en diferentes intervalos temporales, continuidad, etc.)

Procede pues sustituir la ecuación (18) por una ecuación de la forma:

$$dY_t = b(t, Y_t) dt + \sigma(t, Y_t) dX_t \quad (19)$$

a la que el cálculo diferencial de Itô confiere el significado preciso:

$$Y_t = Y_0 + \int_0^t b(s, Y_s) ds + \int_0^t \sigma(s, Y_s) dX_s. \quad (20)$$

Ejemplos de modelos simples de este tipo usados en diversas aplicaciones son:

- $dU_t = -\gamma U_t dt + \sigma dX_t$, proceso de Ornstein-Uhlenbeck diseñado para representar físicamente la velocidad del movimiento de una partícula browniana en presencia de fuerzas de fricción.
- $dS_t = \mu S_t dt + \sigma S_t dX_t$, conocido como movimiento browniano geométrico de tendencia μ y "volatilidad"

σ , que se emplea en las aplicaciones económicas, donde se supone que el precio S_t de un activo se multiplica, en cada dt , por un factor que sigue un proceso de Wiener.

Las ecuaciones diferenciales estocásticas tienen (en condiciones adecuadas) una única solución, Y_t , que constituye una especie de movimiento browniano generalizado, denominado genéricamente un proceso de difusión, cuya variación $Y_{t+h} - Y_t$ no depende de la evolución anterior al instante t , pero cuya distribución depende de la posición Y_t ; concretamente:

$$\begin{aligned} E[Y_{t+h} - Y_t | Y_t] &= hb(t, Y_t) + o(h) \\ E[(Y_{t+h} - Y_t)^2 | Y_t] &= h\sigma^2(t, Y_t) + o(h) \end{aligned}$$

de modo que el desplazamiento infinitesimal medio y su varianza dependen de la posición (y del tiempo).

La relación de los procesos de difusión con las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales transcurren en ambos sentidos:

Ecuaciones de Kolmogorov

Por una parte, si $p(s, x, t, y)$ representa la densidad de probabilidad de que el proceso de difusión, Y_t , solución de la ecuación (19), pase de estar en el instante s en la posición x a ocupar la posición y en el instante posterior t ; se verifica la **ecuación de Kolmogorov del pasado**:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial s} p(s, x, t, y) &= b(s, x) \frac{\partial}{\partial x} p(s, x, t, y) + \\ &+ \frac{1}{2} \sigma^2(s, x) \frac{\partial^2}{\partial x^2} p(s, x, t, y) \end{aligned} \quad (21)$$

así como la **ecuación de Kolmogorov del futuro o ecuación de Fokker-Planck**:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} p(s, x, t, y) &= -\frac{\partial}{\partial x} [b(t, y) p(s, x, t, y)] + \\ &+ \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x^2} [\sigma^2(t, y) p(s, x, t, y)] \end{aligned} \quad (22)$$

Ello significa que para conocer la ley de probabilidad que rige la evolución de Y_t (y que sustituye a la $N(0, \sqrt{t-s})$ del caso browniano) hay que resolver alguna de las ecuaciones (21) o (22).

El problema de Dirichlet

En sentido contrario, en términos de la solución Y_t de la generalización d -dimensional de la ecuación diferencial estocástica (19), puede expresarse la solución del problema de Dirichlet: *determinar una función u en*

un dominio D , conocido su valor f sobre ∂D , que verifique:

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^d a_{i,j}(x) \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_i \partial x_j} + \sum_{i=1}^d b_i \frac{\partial u(x)}{\partial x_i} = -g(x) \quad \text{con } a = \sigma \sigma^T. \quad (23)$$

De hecho, si τ es el primer instante en que Y_t sale de D , la función:

$$u(x) = E^x \left[f(Y_\tau) + \int_0^\tau g(Y_t) dt \right] \quad (24)$$

es solución de la ecuación (23) y coincide con f sobre ∂D si todos los puntos de ∂D son "regulares" para Y_t .

REFERENCIAS

1. Chung, K.L. (1982): *Lectures from Markov Processes to Brownian Motion*. Springer-Verlag.
2. Freedman, D. (1983): *Brownian Motion and Diffusions*. Springer-Verlag.
3. Karatzas, I. & Shreve, S.E. (1991): *Brownian Motion and Stochastic Calculus*. Springer-Verlag.
4. Oksendall, B.K. (1998): *Stochastic differential equations*. Springer-Verlag.
5. Port, S. C. & Stone, C.J. (1978): *Brownian Motion and Classical Potential Theory*. Academic Press.

Ricardo Vélez Ibarrola

Dpto. de Estadística, Investigación Operativa
y Cálculo Numérico

Química

Introducción y aplicaciones de la RMN en Estado Sólido de alta resolución

INTRODUCCIÓN

Durante las últimas décadas la Resonancia Magnética Nuclear (RMN) se ha convertido en la herramienta indispensable para el análisis químico, la determinación estructural y el estudio dinámico de sistemas tanto orgánicos, inorgánicos como biológicos. Aunque la mayoría de los experimentos de RMN son realizados sobre muestras en disolución, la RMN en estado sólido (RMNes), ha ido emergiendo y hoy en día es una de las técnicas más poderosas para el estudio de la estructura molecular y de la dinámica en sólidos, hecho que se ve reflejado en el aumento espectacular de publicaciones científicas que contienen la palabra clave "solid state NMR".

En primer lugar, es necesario considerar cómo y por qué la RMN de muestras sólidas difiere de la RMN en disolución, tanto en la forma de las señales obtenidas en el espectro como a nivel del diseño de

los espectrómetros. En estado sólido el desplazamiento magnético que experimenta un espín nuclear en una molécula varía con la orientación de la misma respecto al campo magnético externo aplicado (anisotropía del desplazamiento químico, ADQ), así pues, la forma de la línea en el espectro es el resultado de una distribución estadística de todas las posibles orientaciones de los cristales, originando una señal muy ancha

(Figura 1). Sin embargo, en disolución, el rápido movimiento molecular promedia la dependencia de la orientación a un valor isotrópico obteniéndose espectros de alta resolución.

Otra fuente de ensanchamiento de la señal es la existencia, en estado sólido, de interacciones anisotrópicas dipolo-dipolo (DD), tanto homo- como heteronucleares, que de nuevo, en disolución son promediadas a cero. Por otro lado, para núcleos con espín $> 1/2$ las interacciones cuadrupolares son la principal fuente de ensanchamiento.

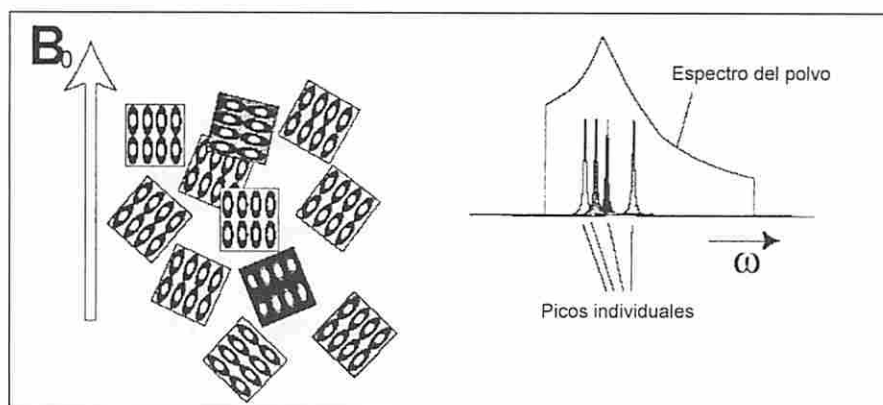


Figura 1. Posibles orientaciones de una muestra policristalina respecto al campo magnético externo B_0 y espectro de RMN del polvo en el que se observa la superposición de las líneas de los distintos monocristales.