



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MEXICO
MAESTRÍA EN CIENCIAS (FÍSICA)
INSTITUTO DE FÍSICA
MATERIA ACTIVA

DIFUSIÓN EFECTIVA EN SISTEMAS DE MATERIA ACTIVA DILUIDA

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:
ENRIQUE PUGA CITAL

DR. ALEJANDRO VÁSQUEZ ARZOLA
INSTITUTO DE FÍSICA

DR. FRANCISCO JAVIER SEVILLA PÉREZ
INSTITUTO DE FÍSICA

DR. DENIS PIERRE BOYER
INSTITUTO DE FÍSICA

CIUDAD DE MÉXICO, JUNIO 2017

Dedicado a mis padres

Agradecimientos

Investigación realizada gracias al Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) de la UNAM IN114717, «Materia activa: modelos de movimiento y fenómenos colectivos», PAPIIT-IA103615 y PAPIIT-IA104917.

Resumen

Las partículas activas son sistemas intrínsecamente fuera de equilibrio debido a complejos mecanismos que convierten localmente energía tomada del entorno en movimiento activo. Describir su naturaleza fuera de equilibrio a través de dichos mecanismos microscópicos resulta bastante complejo por lo cual se adoptó una descripción del movimiento activo desde el punto de vista de los patrones de movimiento, simplificándose con ello la descripción teórica. En el presente trabajo se encontró una descripción que da cuenta de la naturaleza fuera de equilibrio inherente a la materia activa sin recurrir a dichos mecanismos microscópicos sino a las propiedades características del movimiento activo, a saber, autopropulsión y longitud de persistencia, incorporando el marco teórico de equilibrio local. Para explorar esta cuestión se estudió la conexión entre la descripción de patrones de movimiento propios de partículas activas referidos al modelo particular de dinámica «run-and-tumble» y aquellos que pudieran exhibir partículas pasivas difundándose en entornos no homogéneos y por tanto fuera de equilibrio, en ambos casos tratándose con sistemas estacionarios. Dicho estudio se hizo con partículas activas y pasivas sin interacción (límite diluido) moviéndose en una dimensión bajo la influencia de potenciales característicos (lineal, armónico y doble pozo), donde es el confinamiento conferido por los mismos lo que permite que el sistema alcance la estacionariedad y la conexión sea posible. Los procesos en el caso activo y pasivo se describen a través de las distribuciones de probabilidad estacionarias para la posición de la partícula en la región de interés.

Abstract

Active particles are intrinsically out of equilibrium systems due to complex mechanisms that locally convert energy taken from the environment into active motion. To describe its non-equilibrium nature through this mechanisms it is quite difficult. Rather than this we adopted a description from the point of view of active motion patterns. In the present work has been found a description that codifies this non-equilibrium nature by only active motion properties (persistence length and self-propulsion) incorporating local equilibrium framework. For this purpose we studied a connection among active motion patterns referred to «run-and-tumble» model and those exhibited by passive particles diffusing in out of equilibrium systems characterized by inhomogeneity. Furthermore both of this systems are stationary. To explore this connection we worked theoretically with active and passive particles moving in one dimension without any interaction (dilute limit) under the influence of some characteristic potentials: linear, harmonic, double-well. It is precisely this confinement that allows this systems to achieve stationarity. The diffusive processes are described by stationary probability distributions for the position of the particle in the region of interest.

Índice general

Agradecimientos	III
Resumen	V
Abstract	VII
Índice de Figuras	XI
1. Introducción	1
2. Marco teórico	7
2.1. Movimiento browniano pasivo	7
2.1.1. Antecedentes históricos	7
2.1.2. ¿Qué es el movimiento browniano?	9
2.1.3. Ecuación de Langevin	11
2.1.4. Ecuación de Fokker-Planck	15
2.1.5. Teorema de fluctuación-disipación	20
2.1.6. Equilibrio local	26
2.2. Movimiento activo	33
2.2.1. Fricción dependiente de la velocidad	33
2.2.2. Modelo de depósito	36
2.3. Dinámica «run-and-tumble»	38
3. Difusión efectiva e inhomogeneidad	47
3.1. Conexión entre caso pasivo y activo: difusión efectiva	47
3.2. Análisis	51
3.3. Caso activo: «run-and-tumble»	52
3.3.1. Modelo de confinamiento aquimiotáctico	52
3.3.2. Potencial efectivo y fuerza termoforética	53
3.3.3. Difusión y temperatura efectiva	54
3.4. Caso pasivo: ecuación de Langevin	56

3.4.1. Tratamiento matemático	56
3.4.2. Interpretación	57
3.5. Aplicación a potenciales característicos	58
3.5.1. Potencial lineal	58
3.5.2. Potencial armónico	60
3.5.3. Potencial de doble pozo	69
3.6. Distribuciones no-Boltzmann-Gibbs: inhomogeneidad	86
3.7. Movilidad constante y el teorema de fluctuación-disipación local	87
4. Conclusiones	89
A. Solución numérica de la ecuación de Langevin	93
A.1. Consideraciones matemáticas	93
A.2. Código en Matlab	94

Índice de figuras

1.1.	Materia activa a nivel microscópico y macroscópico.	2
1.2.	Explicación esquemática del mecanismo de autopropulsión en un micro- nador: una partícula de Jano es iluminada calentando una de sus capas por encima de la temperatura crítica T_c induciendo con ello la separación de los recubrimientos siendo este el proceso que propulsa a la misma. [1]	3
1.3.	Proceso interno y externo en una partícula Browniana activa.	4
2.1.	Trayectoria irregular observada en una partícula browniana. [2]	9
2.2.	Partícula browniana (mesoscópica) bombardeada por las moléculas (mi- croscópicas) que conforman el medio circundante o baño térmico a una temperatura homogénea.	10
2.3.	Trayectoria de una partícula browniana: (a) Observación a intervalos de 30 s. y (b) a intervalos de 10 s. [2]	11
2.4.	Fricción en función de la velocidad. Se observan los estadios de bombeo para el caso $ \gamma(\mathbf{v}) < 0$ y disipación para $ \gamma(\mathbf{v}) > 0$. [3]	35
2.5.	Dibujo esquemático de la secuencia de eventos durante un viraje («tumble». En este caso la bacteria con dos filamentos cambia su dirección debido a la rotación de uno de ellos.[4]	41
2.6.	Trayectorias del tipo «run-and-tumble» seguidas por E. Coli vistas en un plano. Nótese el movimiento más persistente a diferencia del caso Browniano pasivo.[4]	42
2.7.	Trayectorias «run-and-tumble» en un plano. En la mitad izquierda las bacterias no se encuentran sometidas a un potencial siendo aleatorio su movimiento, en la mitad derecha su dinámica se encuentra influida por un potencial del tipo quimiotáctico. [5]	43
2.8.	Modelo «run-and-tumble» unidimensional.	43
3.1.	E. coli desplazándose ante la influencia del campo gravitacional.	58
3.2.	Potencial armónico visto desde un punto de vista cualitativo. Se indican los puntos de confinamiento y la longitud característica del sistema.	63

3.3.	Densidades de probabilidad de «equilibrio» para distintos valores del parámetro β	64
3.4.	Distribuciones de probabilidad en función del parámetro β contrastadas con el perfil de temperatura efectiva.	65
3.5.	Distribuciones de probabilidad para partículas Brownianas pasivas difundiendo en un medio inhomogéneo no isotérmico.	67
3.6.	Comparación de las distribuciones de probabilidad obtenidas para partículas activas que exhiben patrones de movimiento «run-and-tumble» y aquellas para partículas pasivas moviéndose en un medio efectivo inhomogéneo.	68
3.7.	Potencial de doble pozo ilustrando cualitativamente las cantidades involucradas en su descripción. Para $\eta \leq 1$ se muestra el desplazamiento libre entre ambos pozos de potencial. Cuando $\eta > 1$ la partícula el movimiento de la partícula se encuentra confinado a las regiones correspondientes a los pozos no pudiendo sobrepasar la barrera de energía ΔE	70
3.8.	Dos tipos de regiones de movimiento dependiendo si la fuerza autopropulsiva es menor o mayor a la de atrapamiento.	72
3.9.	Fuerza de atrapamiento en función del parámetro η . Aunque aquí no se muestra explícitamente la fuerza autopropulsiva es claro que para $\eta < 1$ ésta última sería mayor que las fuerzas de atrapamiento. Para $\eta = 2$ esto no se cumple y la fuerza autopropulsiva es menor a la de atrapamiento.	74
3.10.	Conforme el valor de η aumenta, los mínimos del potencial se desplazan haciéndolo con ellos también las distribuciones de probabilidad.	76
3.11.	Potencial de doble pozo normalizado.	77
3.12.	Conforme el valor de η aumenta, los mínimos del potencial se desplazan haciéndolo con ellos también las distribuciones de probabilidad.	77
3.13.	Distribuciones de probabilidad de «equilibrio» para $\eta = 0,5$ y valores crecientes de χ	78
3.14.	Distribuciones de probabilidad de «equilibrio» para $\eta = 0,99$ y valores crecientes de χ	79
3.15.	Contraste entre el perfil de temperatura efectiva en función del parámetro η y las distribuciones de probabilidad caracterizadas por persistencia grande $\chi = 0,05$ en función también de η creciente.	80
3.16.	Distribuciones de probabilidad obtenidas con $\eta = 0,5$ y valores crecientes de χ para partículas Brownianas pasivas en un medio inhomogéneo no isotérmico.	82
3.17.	Distribuciones de probabilidad obtenidas con $\eta = 0,99$ y valores crecientes de χ para partículas Brownianas pasivas en un medio inhomogéneo no isotérmico.	82

3.18. Transición de comportamiento gaussiano (efectos de persistencia no significativos) a comportamiento no-gaussiano (marcados efectos de persistencia), vía el valor crítico χ_{crit} 84

3.19. Comparación de las distribuciones de probabilidad obtenidas para partículas activas que exhiben patrones de movimiento «run-and-tumble» (se supone estacionariedad y $J_{st} = 0$) y aquéllas para partículas pasivas moviéndose en un medio efectivo inhomogéneo. 85

3.20. Comparación de las distribuciones de probabilidad obtenidas para partículas activas que exhiben patrones de movimiento «run-and-tumble» (se supone estacionariedad y $J_{st} = 0$) y aquéllas para partículas pasivas moviéndose en un medio efectivo inhomogéneo. 85

Capítulo 1

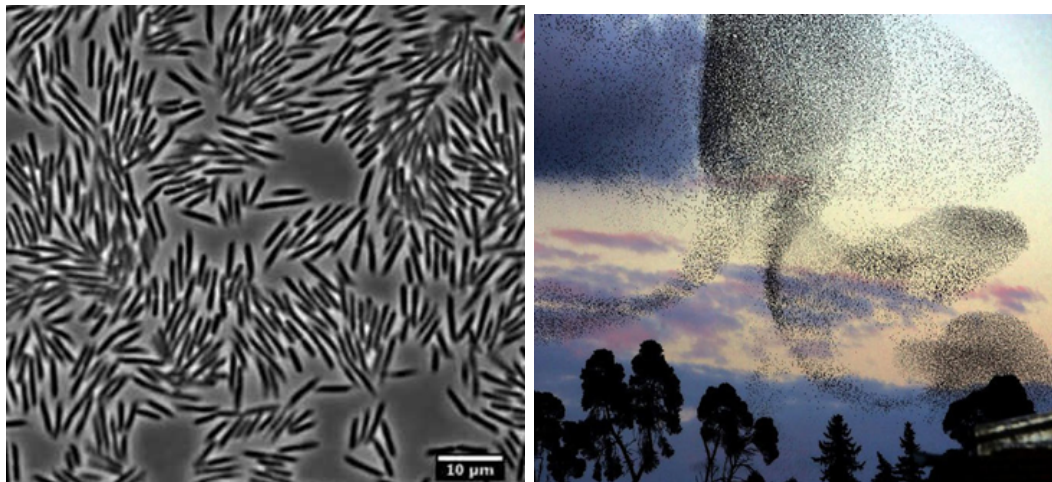
Introducción

La investigación en materia activa, concepto concebido dentro del marco de la Física de Materia Blanda y a nivel fundamental en el seno de la Física Estadística, es una de las áreas más prolíficas y de mayor interés en la actualidad; ésta presenta varios retos en lo teórico y experimental, y encuentra aplicación en ciencias tales como Biología, Química, etc., además de utilizarse como herramienta teórica en disciplinas como Sociología y Economía, por mencionar algunas.

El término *materia activa* de manera general se refiere a un conglomerado constituido de enormes colectividades de individuos que interactúan entre sí, denominados formalmente «agentes brownianos activos». Ahora bien, ¿a qué nos referimos cuando se dice que un sistema es *activo* o muestra *actividad*, en este contexto? Se puede considerar como la habilidad que posee un individuo o un colectivo de dichos individuos para tomar energía de su entorno, posiblemente almacenarla, y convertirla en energía cinética; de lo cual se puede inferir que se trata de un proceso *interno*. Cabe señalar que el término agente browniano activo se refiere a individuos que muestran características que en este caso no se tomarán en cuenta, tales como que éstos pueden crear o responder a un campo autoconsistente, siendo este el caso más general donde se tienen colectivos interactuantes entre sí, punto de partida para el análisis desde el punto de vista de los Sistemas Complejos. En lugar de ello se utiliza el concepto de *partícula activa*, interpretable como una versión más simple de un agente browniano en la cual la característica particular es el movimiento activo que exhibe.

La materia activa estudiada inicialmente en el contexto de los sistemas biológicos, encuentra en éstos un importante bastión de ejemplos. Uno de tantos a nivel microscópico son los llamados motores moleculares, conjunto de moléculas que convierten energía química en movimiento mecánico llevando a cabo tareas específicas a nivel celular, tal es el caso de la kinesina, esencial

en los procesos de mitosis, meiosis y transporte a lo largo de los axones en las neuronas. A nivel macroscópico un organismo superior, por ejemplo cierto animal, se considera un sistema activo ya que toma energía del entorno al momento de alimentarse, la procesa internamente a través de complejos procesos metabólicos y finalmente manifiesta dicha energía en movimiento mecánico, lo que le permite llevar a cabo tareas esenciales para su supervivencia como lo es la misma búsqueda de alimento (forrajeo) por citar un ejemplo; ésta es una de las áreas de mayor interés en teoría del movimiento animal. En los sistemas anteriores y otros más, las entidades activas pueden actuar de manera individual o formar parte de un colectivo pudiendo referirnos a una colonia de bacterias, un cardumen de peces, una parvada de ave (figura 1.1) o una aglomeración de humanos interactuando en determinado sitio, etc. Colectividades de partículas activas o agentes brownianos, exhiben comportamiento complejo, es decir, fenómenos de autoorganización y emergencia, tales como formación de patrones, caoticidad y particular procesamiento de información en dichas interacciones.



(a) Colonia de bacterias *E. coli*

(b) Parvada de pájaros

Figura 1.1: Materia activa a nivel microscópico y macroscópico.

La materia activa es omnipresente en el sentido de que si bien surge en el contexto de sistemas físicos, químicos y biológicos, el concepto de actividad así como las herramientas teóricas utilizadas se pueden aplicar a otros sistemas donde la energía «física» no es el único tipo de «energía» a considerar. Por ejemplo, se puede extender el concepto de actividad a entes no físicos o biológicos, tales como un mercado económico; en éste, la energía física no es el único medio del cual se vale el mercado (ente activo) para llevar a cabo tal

o cual acción, requiere además de otros recursos propios del terreno económico, como que haya «liquidez», es decir, dinero en el mercado, jugando ésta el rol de la «energía» [3].

La materia activa también se puede emular artificialmente. En una primera aproximación se han diseñado partículas, denominadas tipo «Jano», cuya característica esencial es que sus superficies tienen dos o más propiedades físicas distintas conferidas por recubrimientos específicos, siendo esta característica la que a través de varios tipos de mecanismos e.g. termoforéticos, electroforéticos, etc., dota de movimiento activo a la partícula pasiva en un inicio [1] [6], en la figura 1.2 se muestra un ejemplo. El diseño de partículas que imiten el movimiento activo y en última instancia el desarrollo de dispositivos nanotecnológicos activos, es uno de tantos retos en la investigación de partículas activas. Dichos dispositivos denominados microrobots son de suma importancia desde el punto de vista tecnológico por las potenciales aplicaciones que tendrían, particularmente en áreas como terapia génica y aplicación de fármacos en los sitios específicos donde se desarrolla la afectación.

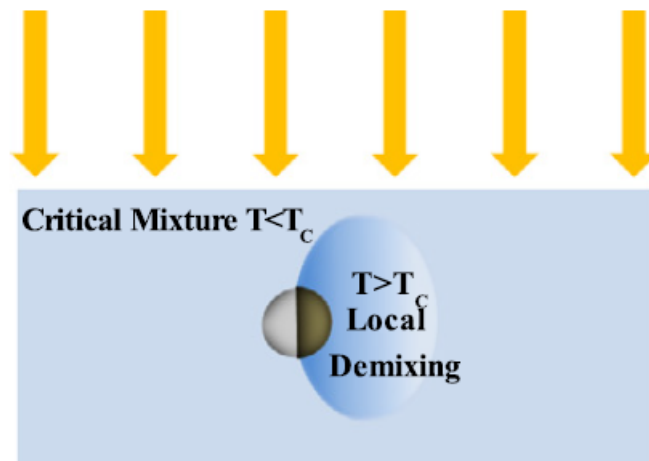


Figura 1.2: Explicación esquemática del mecanismo de autopropulsión en un microrobots: una partícula de Jano es iluminada calentando una de sus capas por encima de la temperatura crítica T_c induciendo con ello la separación de los recubrimientos siendo este el proceso que propulsa a la misma. [1]

Dicho lo anterior ahora nos remitimos a la Física involucrada en el fenómeno activo. Precisamente es la *actividad* o intercambio de energía característico de los sistemas activos lo que mantiene a la partícula en una situación fuera de equilibrio a través de ciertos mecanismos microscópicos internos de naturaleza irreversible. En general un sistema activo se puede ver como si se

tratase de un sistema termodinámico abierto en el cual hay flujos de energía desde y hacia el interior. En adición al proceso interno activo, la partícula puede interactuar con su entorno mecánicamente, siendo pasiva dicha interacción al igual que en una partícula Browniana ordinaria. Por tanto en un sistema activo se pueden distinguir dos procesos: uno interno de naturaleza irreversible y un proceso externo de interacción mecánica con el entorno (figura 1.3).

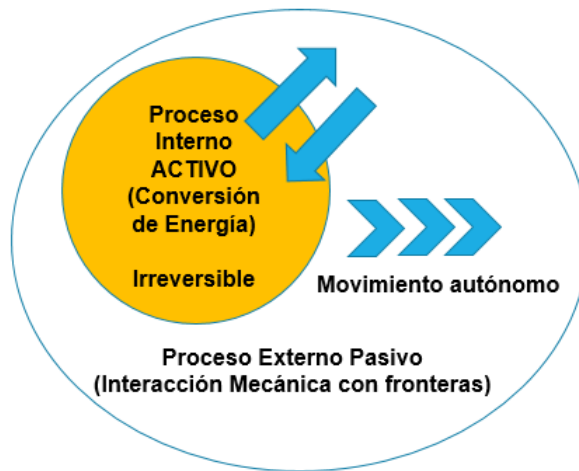


Figura 1.3: Proceso interno y externo en una partícula Browniana activa.

Ahora bien, ¿a qué nos referimos con estos mecanismos que convierten localmente la energía del entorno en movimiento activo? Por lo general son reacciones químicas y fotoquímicas que ocurren al interior de las partículas activas, generando en el proceso inhomogeneidades locales en la composición química, temperatura y densidad, las cuales producen complejos patrones de flujo que mantienen dicho sistema en una situación fuera de equilibrio.

Estos procesos internos de naturaleza irreversible tienen como consecuencia que el movimiento de este tipo de partículas tenga propiedades distintas a aquellas observadas en el caso de partículas pasivas. En este sentido son dos las propiedades características del movimiento activo: 1. El desplazamiento a cierta velocidad constante, v_0 (autopropulsión). 2. La longitud de persistencia o tiempo de persistencia, cantidades grandes en comparación con aquellas observadas en sistemas pasivos.

Con base en los párrafos anteriores podemos identificar dos enfoques o aproximaciones con relación a la descripción de sistemas activos. Por un lado la descripción en términos de los complejos mecanismos locales que mantienen intrínsecamente al sistema en una situación fuera de equilibrio y

por otro lado la referente a las consecuencias de éstos en el movimiento que el sistema exhibe externamente.

Si bien es clara la naturaleza fuera de equilibrio a partir de los mecanismos descritos en párrafos anteriores, explicar la misma en términos de éstos resulta bastante complejo a nivel teórico, ya que implica el acoplamiento de varios fenómenos físicos al mismo tiempo, sólo por mencionar uno de los inconvenientes. Sin embargo, el enfocar la descripción de dichos sistemas a través de los patrones de movimiento observados en ellos, simplifica la descripción teórica de los mismos. Es en este último enfoque pragmático, alrededor del cual se desarrolla el presente trabajo.

Tomando dicho enfoque, en adelante se puede considerar una especie de «caja negra» lo que sucede al interior del sistema activo en lo referente a la conversión de energía y los mecanismos involucrados en ella. Empero persiste el hecho de que estos sistemas se encuentran en una situación de no-equilibrio, con la diferencia de que ahora nos preguntamos cuál es la naturaleza de esto, ya no en referencia a los procesos internos, sino en términos de las propiedades dinámicas características del movimiento activo.

En este sentido explicar dicha naturaleza en estos términos resulta más bien una interpretación que se puede asociar a este comportamiento de no-equilibrio, enfatizándose que no significa que ésta sea la causa «real» del mismo, la cual sabemos se encuentra en los procesos internos de la partícula activa así como su continuo intercambio de energía con el entorno. Ejemplo de este tipo de interpretaciones es el bien conocido caso de la asociación de una temperatura efectiva a sistemas activos y pasivos fuera de equilibrio. En situaciones simples (partículas libres, sin interacción con otras partículas), la difusión de una partícula activa se puede interpretar como si se tratase de una partícula pasiva difundiendo en un medio «más caliente» caracterizado por una temperatura que en adición a aquella del baño térmico, muestra una contribución «efectiva» homogénea, i.e., $T = T_{baño} + T_{eff}$, la cual da cuenta de la disipación de las fluctuaciones no térmicas [7], remitiéndonos con ello a una situación de equilibrio tipo Boltzmann. Así, no es que ése sea exactamente el mecanismo que ocurre realmente, sino que se establece una equivalencia donde dicho fenómeno se puede interpretar ahora en términos de un sistema browniano pasivo ordinario. Lo anterior se ha demostrado experimentalmente por ejemplo al introducir una perla como «termómetro» a un baño de bacterias (sistema activo). El comportamiento de la misma muestra temperaturas efectivas mayores en dos o tres órdenes de magnitud respecto a la temperatura ambiente [8].

Determinar con precisión la impronta de la Física de no-equilibrio a partir de las propiedades del movimiento activo, ya sea que las partículas interactúen o no, y qué tanto se aleja ésta del equilibrio, ha sido tema de

creciente interés en esta área [9]. En el ánimo de establecer una descripción que pudiera clarificar estas cuestiones, se desarrolla este trabajo, explorando en el camino una conexión entre el movimiento activo y aquél efectuado por partículas brownianas pasivas difundiendo con movilidad constante en un medio inhomogéneo no isotérmico, donde es precisamente un término de difusión/temperatura efectiva *dependiente del espacio* que sirve de puente entre ambos casos. Si bien es cierto que se ha tratado tanto a nivel teórico como experimental el concepto de temperatura efectiva para sistemas fuera de equilibrio [10, 11], por lo general se trata de sistemas donde se puede definir un término homogéneo [12, 7, 13, 14] a diferencia del presente trabajo donde se explora la posible extensión al caso inhomogéneo espacialmente.

En particular se utiliza el modelo de «run-and-tumble» en el contexto de los patrones dinámicos que exhiben bacterias que a través de procesos metabólicos internos y características morfológicas externas (flagelos, cilios) son capaces de producir movimiento autopropulsado dirigido.

La estructura consta de un marco teórico (capítulo 2) en el cual se establecen los fundamentos teóricos esenciales para tratar tanto el movimiento browniano pasivo así como los correspondientes al movimiento activo, en particular la dinámica «run-and-tumble». Posteriormente en el capítulo 3, se desarrolla la idea de la conexión entre movimiento pasivo y activo a través de la expresión para la difusión efectiva, aplicándose posteriormente a partículas activas/pasivas bajo la influencia de potenciales lineal, armónico y doble pozo. Finalmente en el capítulo 4 se recapitulan los resultados más importantes obteniéndose conclusiones generales en torno a las cuestiones planteadas en párrafos anteriores sobre la naturaleza fuera de equilibrio de los sistemas activos.

Los resultados obtenidos en el presente trabajo de tesis serán enviados para su publicación en la revista Physical Review E, de la APS (American Physical Society).

Capítulo 2

Marco teórico

2.1. Movimiento browniano pasivo

La teoría de movimiento browniano ha ocupado un rol central en varios aspectos tanto teóricos como experimentales de la Física, siendo su desarrollo uno de los logros de mayor impacto a principios del siglo XX, junto a la Teoría Cuántica y la Relatividad. Dicha importancia puede ser entendida si abstraemos las características esenciales del movimiento encontrando que su fenomenología se encuentra inmersa en muchos otros campos de estudio como teoría de circuitos eléctricos, conductividad, láseres y como punto de partida del tema a abordar en el presente trabajo: el movimiento de partículas brownianas activas.

2.1.1. Antecedentes históricos

Podemos remontarnos hasta 1784, fecha en la que Jan Ingen-Hausz documentó el movimiento irregular que exhibían partículas pequeñas en determinado medio, en su caso partículas de carbón en polvo en un fluido. Posteriormente, en 1827, dicho movimiento irregular adquiriría importancia (y el nombre) de la mano de las observaciones del botánico inglés Robert Brown [15], quien estudiando al microscopio cómo se movían los granos de polen, esto en aras de comprender mejor el proceso de inseminación en plantas, observó con mayor detalle dicho fenómeno. En un principio atribuyó su origen a las partículas mismas, proponiendo incluso el nombre de «moléculas activas»; más adelante, en 1863, C. Wiener [16] después de observaciones experimentales propuso una noción más cercana a la explicación moderna: el movimiento «perpetuo» e irregular se debe al movimiento no de la partícula en adelante referida como browniana, sino al de las partículas en el medio circundante que la impactan continuamente; no es de extrañar esta propuesta

si tomamos en cuenta que en 1859 Maxwell había formulado su famosa distribución de velocidades, siendo esta noción uno de los primeros atisbos de la naturaleza molecular y atómica de la materia que tendría como consecuencia el desarrollo de la Teoría Cinética y en última instancia la misma Física Estadística. En efecto, la explicación del movimiento browniano en la segunda mitad del siglo XIX fue el campo de batalla donde se enfrentaron dos puntos de vista aparentemente opuestos, por un lado estaban los que creían que solo eran necesarias las consideraciones de la Termodinámica para su explicación y por otro quienes defendían la naturaleza intrínsecamente microscópica de la materia en su constitución y que atribuían la explicación de dicho fenómeno a las colisiones de las moléculas constituyentes del medio circundante sobre la partícula browniana. En 1879 Nägeli se propuso refutar esto último. Estudiando las colisiones entre *una* molécula del fluido (con la misma velocidad) y la partícula browniana concluyó que dichas colisiones eran insignificantes cuando de mover a la partícula browniana se trataba descartando así que esa fuera la causa. En 1889, Gouy [17], después de un detallado análisis experimental llegó a ciertas conclusiones observacionales, tales como que si la viscosidad del fluido circundante disminuye, el movimiento browniano se ve amplificado, lo mismo sucede al aumentar la temperatura y si las partículas son más pequeñas.

Fue hasta 1905 el año en que Einstein [18] por primera vez obtuvo teóricamente una explicación satisfactoria combinando el proceso estocástico elemental conocido como caminata aleatoria con la distribución de velocidades de Maxwell-Boltzmann, la cual fue clave en el desarrollo y uno de los errores en los que incurrió Nägeli al no considerar dicha naturaleza estadística; no todas las moléculas se movían con la misma velocidad además en un segundo las colisiones eran del orden de 10^{20} siendo su impacto verdaderamente significativo para la partícula browniana. Ahora bien, ¿cuál fue la explicación de Einstein? Tal como había propuesto Wiener, el movimiento errático de las partículas se podía explicar en términos del ruido térmico generado por las moléculas (microscópicas) que conforman el medio circundante cuando impactan a la partícula browniana (mesoscópica). Matemáticamente, la teoría de Einstein se sustentó en una ecuación diferencial parcial parabólica para la distribución de densidad de probabilidad del desplazamiento en una dimensión; este tipo de ecuaciones son conocidas actualmente con el nombre de ecuaciones de Fokker-Planck. En 1906 Smoluchowski [19] desarrolló una teoría cinética del movimiento browniano obteniendo resultados análogos a los de Einstein, corroborando que el movimiento de la partícula se debe a la agitación molecular del medio en que se haya inmersa, todo esto a partir de un formalismo matemático similar al de Einstein; por tal motivo a este tipo de enfoque referido a la evolución temporal de una distribución de probabilidad,

se le conoce como Teoría Einstein-Smoluchowski. Los resultados obtenidos en dicha teoría fueron corroborados experimentalmente posteriormente por Perrin [20] recibiendo por ello el Premio Nobel de 1926.

La teoría desarrollada por Einstein y Smoluchowski aunque acertada, parecía no ser intuitiva en el sentido la mecánica Newtoniana, piedra angular de la explicación teórica dada al movimiento de los cuerpos. En este sentido fue que Langevin [21] plantea su teoría en 1908, más conectada a la formulación de Newton aunque con un ingrediente adicional: la aleatoriedad en las fuerzas que inducen el movimiento. N. Wiener extiende estos conceptos desarrollando con ello la Teoría de Procesos Estocásticos, contribuyendo a su consolidación otros físicos y matemáticos entre los que se cuentan Uhlenbeck, Wang y Ornstein; todos ellos con el objetivo de refinar y formalizar la teoría del movimiento browniano.

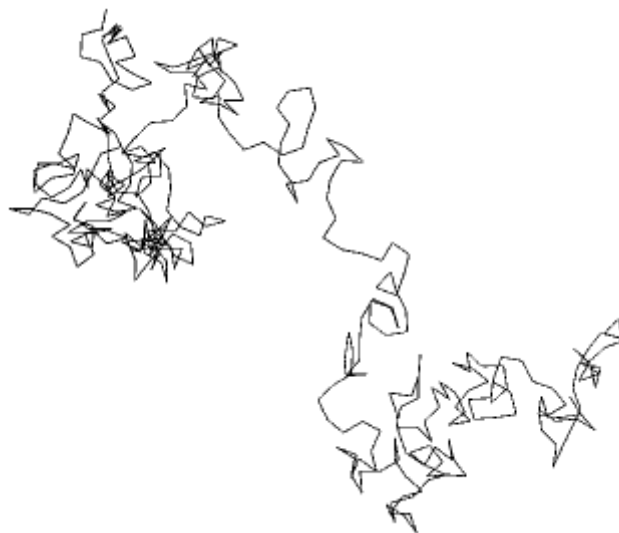


Figura 2.1: Trayectoria irregular observada en una partícula browniana. [2]

2.1.2. ¿Qué es el movimiento browniano?

El movimiento browniano es el movimiento aleatorio observado en partículas del orden mesoscópico (partículas brownianas) debido a las incesantes colisiones de las partículas del orden microscópico que conforman el fluido circundante en que se encuentran inmersas (figura 2.2). Las trayectorias descritas por la partícula browniana son irregulares (figura 2.1) y por supuesto dependen de los tiempos de observación experimental, es decir, los puntos de muestreo en el trayecto no serán los mismos que si se observa a la partícula en intervalos de 30 s, que si se hace cada 10 s como se puede observar en

la figura 2.3, aumentando por supuesto dicha irregularidad si los tiempos de observación se hacen más pequeños. Como demostró N. Wiener [22] en 1923, dichos puntos de muestra presentan continuidad en prácticamente todo sitio, caso distinto a la diferenciabilidad, no presente en ningún punto. Cabe mencionar que además dicha trayectoria representa una de los ejemplos más citados de lo que ahora se conoce como un *fractal aleatorio* [23], estructuras que presentan autosimilaridad ante cambios en la escala de observación.

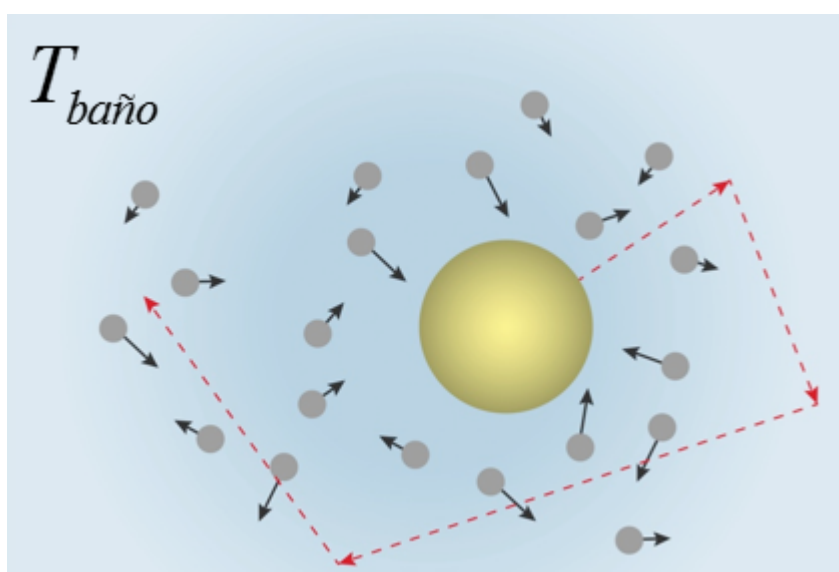


Figura 2.2: Partícula browniana (mesoscópica) bombardeada por las moléculas (microscópicas) que conforman el medio circundante o baño térmico a una temperatura homogénea.

Perrin en su experiencia experimental nos brinda una vívida descripción de la fenomenología del movimiento: «En un fluido en equilibrio, como el agua dentro de un vaso, todas sus partes aparecen completamente sin movimiento. Si ponemos en el agua un objeto de mayor densidad, cae. La caída, es cierto, será más lenta si el objeto es menor; pero un objeto visible siempre termina en el fondo del vaso y no tiende a subir. Sin embargo, sería difícil examinar durante mucho tiempo una preparación de partículas muy finas en un líquido sin observar un movimiento perfectamente irregular. Se mueven, se detienen, empiezan de nuevo, suben, bajan, suben otra vez, sin que se vea que tiendan a la inmovilidad».

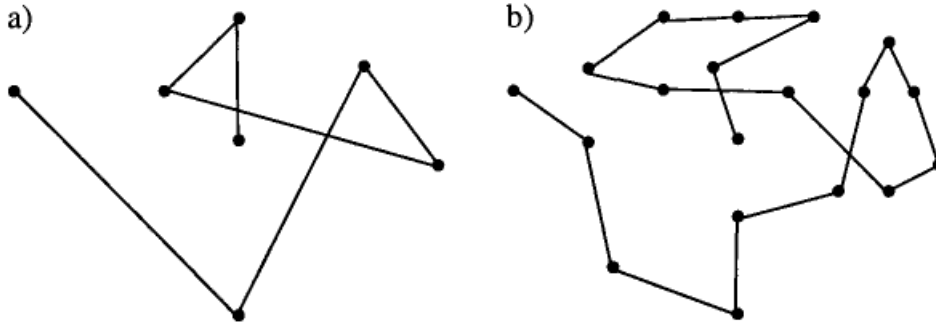


Figura 2.3: Trayectoria de una partícula browniana: (a) Observación a intervalos de 30 s. y (b) a intervalos de 10 s. [2]

A continuación se desarrollan brevemente algunos de los aspectos más importantes de los dos enfoques teóricos utilizados frecuentemente para tratar el movimiento browniano, a saber la ecuación de Langevin y la ecuación de Fokker-Planck.

2.1.3. Ecuación de Langevin

De acuerdo a la dinámica Newtoniana podemos describir el movimiento de la partícula browniana con

$$m \frac{d\mathbf{v}(t)}{dt} = \mathbf{F}, \quad (2.1)$$

donde en general las contribuciones a la fuerza actuando sobre la partícula son

- (i) Una fuerza disipativa (fricción) que ejerce el fluido circundante, siendo proporcional a la velocidad de la partícula a través del coeficiente γ ó su inverso $\mu = \frac{1}{\gamma}$, este último referido en adelante como la movilidad de la partícula Browniana, es decir, la velocidad de corriente («drift») que adquiere la partícula por unidad de fuerza externa.
- (ii) Una fuerza estocástica $\mathcal{F}(t)$ que fluctúa «rápidamente»; siendo su fuente las colisiones de las moléculas que conforman el fluido circundante contra la partícula Browniana.
- (iii) Una fuerza externa derivable de un potencial (conservativa) $U(\mathbf{r})$. Por ejemplo el campo gravitatorio actuando en la partícula.

Lo anterior se puede expresar matemáticamente como

$$m \frac{d\mathbf{v}(t)}{dt} = -\nabla U(\mathbf{r}) - \gamma \mathbf{v}(t) + \mathcal{F}(t), \quad (2.2)$$

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}, \quad (2.3)$$

ó en términos del momento lineal

$$\frac{d\mathbf{p}(t)}{dt} = -\nabla U(\mathbf{r}) - \frac{\gamma}{m} \mathbf{p}(t) + \mathcal{F}(t), \quad (2.4)$$

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{m}. \quad (2.5)$$

Las ecuaciones (2.4) y (2.5) se conocen como ecuaciones de Langevin para el momento en el régimen subamortiguado.

En su trabajo original, Langevin supuso que las fuerzas estocásticas a lo largo del tiempo se encontraban «poco» correlacionadas y que sobre intervalos largos de tiempo su valor promedio debía ser nulo debido a la fluctuación tan rápida de las mismas. Posteriormente Ornstein y Uhlenbeck formalizaron dicha noción señalando que la fuerza estocástica debía distribuirse de manera gaussiana con componentes independientes y además correlacionarse temporalmente a través de una función δ de Dirac, es decir

$$\langle \mathcal{F}(t) \rangle = 0, \quad (2.6)$$

$$\langle \mathcal{F}_i(t) \mathcal{F}_j(t') \rangle = 2D_p \delta_{i,j} \delta(t - t'), \quad i, j = x, y, z, \quad (2.7)$$

donde las componentes de la fuerza estocástica $\mathcal{F}_i(t)$ son referidas en la terminología de procesos estocásticos con el nombre de ruido blanco gaussiano, siendo D_p la intensidad o amplitud del ruido para el momento.

Ahora, (2.2) y (2.3) se pueden reescribir con el fin de obtener ecuaciones de Langevin para la velocidad

$$\frac{d\mathbf{v}(t)}{dt} = -\frac{\nabla U(\mathbf{r})}{m} - \frac{\gamma}{m} \mathbf{v}(t) + \sqrt{2D_v} \boldsymbol{\xi}(t), \quad (2.8)$$

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}, \quad (2.9)$$

donde D_v es la amplitud del ruido para la velocidad y se relaciona con la amplitud del ruido para el momento a través de $D_p = m^2 D_v$. En este caso las fuerzas estocásticas deben cumplir

$$\langle \boldsymbol{\xi}(t) \rangle = 0, \quad (2.10)$$

$$\langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle = \delta(t - t'), \quad i, j = x, y, z. \quad (2.11)$$

Para modelar la dinámica de una partícula browniana se introdujeron las fuerzas estocásticas $\mathcal{F}(t)$, variables aleatorias (o procesos) que a su vez inducen a otras variables tales como $\mathbf{r}(t)$ y $\mathbf{v}(t)$ a adquirir un carácter estocástico; este tipo de ecuaciones fueron uno de los ejemplos pioneros de lo que actualmente se conoce como ecuaciones diferenciales estocásticas. Ahora bien, desde el punto de vista físico la pregunta inmediata que se busca resolver es qué tanto se ha desplazado la partícula transcurrido cierto tiempo de lo cual da cuenta el desplazamiento cuadrático medio $\langle r^2(t) \rangle$, cantidad eminentemente estocástica.

Las ecuaciones (2.8) y (2.9) se pueden resolver para el caso en que $\nabla U(\mathbf{r}) = 0$; realizando el producto escalar con la posición instantánea de la partícula, tomando el promedio sobre el ensamble de dicho producto y utilizando el hecho de que el promedio de la fuerza estocástica es cero, se tiene

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle r^2 \rangle + \frac{1}{\tau} \frac{d}{dt} \langle r^2 \rangle = 2 \langle v^2 \rangle, \quad (2.12)$$

en la cual se puede sustituir el valor de equipartición $\langle v^2 \rangle = 3k_B T$. Con esto la ecuación se puede resolver fácilmente para el caso en que a $t=0$, tanto $\langle r^2 \rangle$ como su primera derivada son cero, con esto el desplazamiento cuadrático medio está dado por

$$\langle r^2(t) \rangle = \frac{6k_B T \tau^2}{m} \left\{ \frac{t}{\tau} - \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \right] \right\}, \quad (2.13)$$

siendo T la temperatura absoluta y $\tau = \frac{m}{\gamma}$ el tiempo característico de relajación. Para el caso en que $t \ll \tau$ (régimen balístico) se tiene un comportamiento consistente con las ecuaciones de movimiento ordinarias

$$\langle r^2(t) \rangle = \langle v^2 \rangle t^2, \quad (2.14)$$

mientras que para $t \gg \tau$ (régimen difusivo) se tiene

$$\langle r^2(t) \rangle = 6 \frac{k_B T}{\gamma} t, \quad (2.15)$$

de donde se puede obtener la conocida relación de Eintein que define el coeficiente de difusión D_E

$$D_E = \frac{k_B T}{\gamma}. \quad (2.16)$$

Así, (2.15) se puede generalizar a

$$\langle r^2(t) \rangle = 2dD_E t, \quad (2.17)$$

donde d denota la dimensión del movimiento browniano.

En el caso del presente trabajo es menester tratar el denominado régimen *sobreamortiguado*. Como se verá en desarrollos posteriores, para el caso de partículas pasivas se supone que la dinámica de éstas se corresponde con dicho régimen [24] [4]. Éste resulta particularmente útil cuando la dinámica del fluido se describe con números de Reynolds bajos. Si se supone que la fricción ejercida por el medio circundante es grande en comparación al desplazamiento inercial de la partícula en el medio, entonces las fuerzas inerciales se pueden despreciar en comparación con las fuerzas viscosas. Así, la ecuación (2.8) se puede reescribir sin pérdida de generalidad considerando $m = 1$, por lo que $D_p = D_v = D$.

Con lo anterior se obtiene la ecuación de Langevin en el régimen sobreamortiguado

$$\frac{d\mathbf{r}(t)}{dt} = \mathbf{v}(t) = -\frac{\nabla U(\mathbf{r})}{\gamma} + \sqrt{2D_x} \boldsymbol{\xi}(t), \quad (2.18)$$

con amplitud del ruido

$$D_x = \frac{D}{\gamma^2}. \quad (2.19)$$

Para concluir esta sección, las ecuaciones de Langevin tratadas anteriormente (régimen subamortiguado y amortiguado) se pueden generalizar de la siguiente forma

$$\frac{dr_i}{dt} = A_i(r_i, t) + \sum_k B_{ik}(r_i, t) \Gamma_k(t), \quad (2.20)$$

sujeta a las propiedades estadísticas

$$\langle \Gamma_k(t) \rangle = 0, \quad (2.21)$$

$$\langle \Gamma_k(t) \Gamma_l(t') \rangle = 2D\delta_{kl}\delta(t-t'), \quad (2.22)$$

donde el subíndice i denota las dimensiones y D la amplitud de este ruido gaussiano. El término $A_i(r_i, t)$ físicamente corresponde al proceso de transporte de la partícula en el fluido circundante, por ello se denomina término de *corriente* (drift), mientras que $B_{ik}(r_i, t) \Gamma_k(t)$ corresponde a los procesos difusivos, denominándose por tanto término de difusión.

2.1.4. Ecuación de Fokker-Planck

Si bien la descripción en términos de la ecuación de Langevin proporcionó un enfoque intuitivo desde el punto de vista físico, no es la única manera de abordar el problema del movimiento de una partícula Browniana. En el enfoque Langevin conocido formalmente como Teoría de Ornstein-Uhlenbeck, se utilizó la descripción de la variación temporal de procesos estocásticos para averiguar sus momentos estadísticos, en particular el referente al desplazamiento de la partícula. Matemáticamente, podemos abordar de manera equivalente el problema tratando directamente con las densidades de probabilidad, es decir, ahora se busca responder la pregunta (por simplicidad en una dimensión): ¿cuál es la probabilidad de encontrar un valor $x(t)$ (de la trayectoria) correspondiente al ensamble de procesos $\mathbf{x}(t)$ (todas las posibles trayectorias que sigue la partícula) a cierto tiempo t entre x y $x + dx$? Esta descripción fue la empleada por Einstein y la primera en explicar el movimiento browniano teóricamente, actualmente se denomina a este enfoque probabilístico Teoría de Einstein-Smoluchowski.

La teoría de Ornstein-Uhlenbeck y Einstein-Smoluchowski son descripciones equivalentes matemáticamente y en principio se puede pasar de una a la otra. Aquí se hará de manera general utilizando algunos resultados bien conocidos de la teoría de Procesos Estocásticos. Por simplicidad se hará para una dimensión, pudiendo realizarse de manera análoga para más dimensiones. Las ecuaciones (2.19)-(2.21) en una dimensión son

$$\frac{dx}{dt} = A(x, t) + B(x, t) \Gamma(t), \quad (2.23)$$

$$\langle \Gamma(t) \rangle = 0, \quad (2.24)$$

$$\langle \Gamma(t) \Gamma(t') \rangle = 2D\delta(t - t'), \quad (2.25)$$

donde las propiedades estadísticas (2.23) y (2.24) que confieren gaussianidad al ruido $\Gamma(t)$ tienen implicaciones definitivas en la teoría de las ecuaciones de Langevin garantizando que la solución (proceso) de una ecuación diferencial estocástica sea Markoviana. Para cada función muestra (realización) $\Gamma(t)$ del ensamble $\Gamma(t)$, la función muestra $x(t)$ de $\mathbf{x}(t)$ queda determinada unívocamente con la condición inicial $x(t_0)$, además el hecho de que los valores del término fluctuante se encuentren relacionados a través de una función delta de Dirac implica que éstos son independientes estadísticamente, por tanto, los valores de $\Gamma(t)$ a tiempos previos por ejemplo $t' < t_0$ no pueden influir las probabilidades condicionales a tiempos $t > t_0$, característica definitoria de un proceso de memoria corta formalmente conocido como Proceso de Markov. Una demostración rigurosa de lo anterior se puede encontrar en [25].

El hecho de que la solución a la ecuación de Langevin sea un proceso de Markov implica que ésta obedece una Ecuación Maestra la cual se puede expresar en la denominada expansión de Kramers-Moyal para la función de densidad de probabilidad. En una dimensión la expansión está dada por

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!} \frac{\partial^m}{\partial x^m} [a^{(m)}(x, t) P(x, t)], \quad (2.26)$$

donde los coeficientes $a^{(m)}$ conocidos como «momentos de salto» están dados por

$$a^{(m)}(x, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \langle |\mathbf{x}(t + \Delta t) - \mathbf{x}(t)|^m \rangle. \quad (2.27)$$

Para pasar de la ecuación de Langevin a su equivalente probabilístico, la ecuación de Fokker-Planck, se requiere calcular los coeficientes de Kramers-Moyal correspondientes, para esto la ecuación de Langevin (2.23) se puede expresar como la ecuación integral

$$x(t + \Delta t) - x_0 = \int_t^{t+\Delta t} dt_1 A[x(t_1), t_1] + \int_t^{t+\Delta t} dt_1 B[x(t_1), t_1] \Gamma(t_1). \quad (2.28)$$

Expandiendo en serie de Taylor alrededor del valor inicial x_0

$$A[x(t_1), t_1] = A(x_0, t_1) + A'(x_0, t_1)[x(t_1) - x_0] + \dots, \quad (2.29)$$

$$B[x(t_1), t_1] = B(x_0, t_1) + B'(x_0, t_1)[x(t_1) - x_0] + \dots, \quad (2.30)$$

y sustituyendo en (2.28)

$$\begin{aligned} x(t + \Delta t) - x_0 &= \int_t^{t+\Delta t} dt_1 A(x_0, t_1) \\ &+ \int_t^{t+\Delta t} dt_1 A'(x_0, t_1)[x(t_1) - x_0] + \dots \\ &+ \int_t^{t+\Delta t} dt_1 B(x_0, t_1) \\ &+ \int_t^{t+\Delta t} dt_1 A'(x_0, t_1)[x(t_1) - x_0] \Gamma(t_1) + \dots \end{aligned} \quad (2.31)$$

Ahora se puede iterar la diferencia $x(t_1) - x_0$ en la expresión anterior obteniéndose

$$x(t + \Delta t) - x_0 = \int_t^{t+\Delta t} dt_1 A(x_0, t_1)$$

$$\begin{aligned}
& + \int_t^{t+\Delta t} dt_1 A'(x_0, t_1) \int_t^{t_1} dt_2 A(x_0, t_2) \\
& + \int_t^{t+\Delta t} dt_1 A'(x_0, t_1) \int_t^{t_1} dt_2 B(x_0, t_2) \Gamma(t_2) + \dots \\
& + \int_t^{t+\Delta t} dt_1 B(x_0, t_1) \Gamma(t_1) \\
& + \int_t^{t+\Delta t} dt_1 B'(x_0, t_1) \Gamma(t_1) \int_t^{t_1} dt_2 A(x_0, t_2) \\
& + \int_t^{t+\Delta t} dt_1 B'(x_0, t_1) \Gamma(t_1) \int_t^{t_1} dt_2 B(x_0, t_2) \Gamma(t_2) + \dots \quad (2.32)
\end{aligned}$$

Por la expresión para los coeficientes se requiere obtener el promedio de la ecuación anterior; manteniendo $x = x(t)$ fijo y utilizando las propiedades estadísticas del ruido gaussiano se tiene

$$\begin{aligned}
\langle x(t + \Delta t) - x \rangle &= \int_t^{t+\Delta t} dt_1 A(x, t_1) \int_t^{t_1} dt_2 A(x, t_2) \\
& + 2D \int_t^{t+\Delta t} dt_1 B'(x, t_1) \int_t^{t_1} dt_2 B(x, t_2) \delta(t_2 - t_1) + \dots \quad (2.33)
\end{aligned}$$

además, de la propiedad para una función δ de Dirac, $\int_{t_0}^{t_1} dt \delta(t - t_0) f(t) = \frac{1}{2} f(t_0)$, se tiene en el integrando

$$\int_t^{t_1} dt_2 B(x, t_2) \delta(t_2 - t_1) = \frac{1}{2} B(x, t_1). \quad (2.34)$$

Por tanto, para el primer coeficiente de Kramers-Moyal, $a^{(1)}$, al tomar el límite $\Delta t \rightarrow 0$ solo se mantienen las integrales de orden Δt , obteniéndose

$$a^{(1)}(x, t) = A(x, t) + DB(x, t) \frac{\partial B(x, t)}{\partial x}. \quad (2.35)$$

Análogamente para $a^{(2)} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \langle |x(t + \Delta t) - x|^2 \rangle$

$$\begin{aligned}
a^{(2)}(x, t) &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt_1 B(x, t_1) \\
& \int_t^{t+\Delta t} dt_2 B(x, t_2) 2D \delta(t_1 - t_2) = 2DB^2(x, t). \quad (2.36)
\end{aligned}$$

Los coeficientes para $m \geq 3$ se consideran nulos de acuerdo al teorema de Pawula [26].

En resumen los exponentes en la expansión de Kramers-Moyal son

$$a^{(1)}(x, t) = A(x, t) + DB(x, t) \frac{\partial B(x, t)}{\partial x} \quad (2.37)$$

$$a^{(2)}(x, t) = 2DB^2(x, t), \quad (2.38)$$

$$a^{(m)}(x, t) = 0. \quad (2.39)$$

Sustituyendo los coeficientes en la expansión de Kramers-Moyal (2.26) se obtiene la ecuación de Fokker-Planck para una dimensión

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \left[A(x, t) + DB(x, t) \frac{\partial B(x, t)}{\partial x} \right] P \right\} + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} [B^2(x, t) P], \quad (2.40)$$

la cual se puede generalizar al caso multivariable en tres dimensiones

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = & -\sum_i \frac{\partial}{\partial y_i} \left\{ \left[A_i(\mathbf{r}, t) + D \sum_{jk} B_{jk}(\mathbf{r}, t) \frac{\partial B_{ik}(\mathbf{r}, t)}{\partial x_j} \right] P(\mathbf{r}, t) \right\} \\ & + D \sum_{ij} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \left\{ \left[\sum_k B_{ik}(\mathbf{r}, t) B_{jk}(\mathbf{r}, t) \right] P(\mathbf{r}, t) \right\}. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Con la expresión general anterior es posible pasar del formalismo Ornstein-Uhlenbeck (ec. Langevin) al formalismo Einstein-Smoluchowski (ec. Fokker-Planck) de manera directa. A continuación se obtendrán las ecuaciones de Fokker-Planck equivalentes a las ecuaciones de Langevin en la coordenada de velocidad, tanto en el régimen subamortiguado y sobreamortiguado.

Ecuación de Klein-Kramers

Las ecuaciones de Langevin en el régimen subamortiguado (2.8) y (2.9), se pueden expresar en una dimensión como

$$\frac{dv}{dt} = -\gamma v - U'(x) + \boldsymbol{\xi}(t), \quad (2.42)$$

$$\frac{dx}{dt} = v, \quad (2.43)$$

con las propiedades del ruido

$$\langle \boldsymbol{\xi}(t) \rangle = 0, \quad (2.44)$$

$$\langle \xi(t) \xi(t') \rangle = 2D_v \delta(t - t'). \quad (2.45)$$

Ahora se pueden identificar directamente en (2.41) los términos A_i y B_{jk}

$$A_x = v, \quad A_v = -(\gamma v + U'(x)), \quad (2.46)$$

y

$$B_{xx} = 0, \quad B_{xv} = 0, \quad B_{vx} = 0, \quad B_{vv} = 1, \quad (2.47)$$

con lo cual sustituyendo en (2.41) se obtiene la correspondiente ecuación de Fokker-Planck en una dimensión

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -v \frac{\partial P}{\partial x} + U'(x) \frac{\partial P}{\partial v} + \gamma \frac{\partial v P}{\partial v} + D \frac{\partial^2 P}{\partial v^2}, \quad (2.48)$$

expresándose en tres dimensiones como

$$\frac{\partial P(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t \mid \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t_0)}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial P}{\partial \mathbf{r}} - \nabla U(\mathbf{r}) \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left[\gamma \mathbf{v} P + D_v \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}} \right]. \quad (2.49)$$

La expresión anterior se conoce como ecuación de Kramers o Klein-Kramers, siendo un tipo de ecuación de Fokker-Planck para la densidad de probabilidad dependiente de velocidad y posición que describe el movimiento browniano pasivo en cierto potencial de fuerza externo, originalmente derivada por Kramers para modelar la cinética en una reacción química.

Ecuación de Smoluchowski

Como se mencionó en la sección anterior, la ecuación (2.18) para el régimen sobreamortiguado es de particular interés en este trabajo, por lo que resulta útil obtener su ecuación de Fokker-Planck equivalente; para ello dicha ecuación en una dimensión se puede expresar como

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{1}{\gamma} \frac{dU(x)}{dx} + \xi(t), \quad (2.50)$$

con

$$\langle \xi(t) \xi(t') \rangle = 2D_x \delta(t - t'), \quad (2.51)$$

de donde se pueden obtener los términos

$$A = -\frac{1}{\gamma} \frac{dU(x)}{dx}, \quad B = 1, \quad (2.52)$$

y finalmente sustituyendo en (2.40)

$$\frac{\partial P(x)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\gamma} \frac{dU(x)}{dx} P(x) \right] + D_x \frac{\partial^2 P(x)}{\partial x^2}, \quad (2.53)$$

generalizándose a tres dimensiones

$$\frac{\partial P(\mathbf{r}, t | \mathbf{r}_0, t_0)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left[\frac{\nabla U(\mathbf{r})}{\gamma} P \right] + D_x \frac{\partial^2 P}{\partial r^2}. \quad (2.54)$$

Esta ecuación de Fokker-Planck es conocida usualmente como ecuación de Smoluchowski. La solución en el estado estacionario se obtiene trivialmente siendo

$$P_{\text{st}}(\mathbf{r}) = \mathcal{N} \exp \left[-\frac{U(\mathbf{r})}{\gamma D_x} \right], \quad (2.55)$$

la cual en equilibrio térmico es equivalente a la distribución de Boltzmann en virtud de que como se verá en el apartado correspondiente a fluctuación-disipación (ec. 2.94), D_x es equivalente a D_E en la relación Einstein-Sutherland (ec. 2.16). Por tanto, sustituyendo en (2.55) se tiene que la densidad de probabilidad estacionaria en realidad se puede tomar como la distribución Boltzmann-Gibbs

$$P_{\text{st}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{Z} \exp \left[-\frac{U(\mathbf{r})}{k_B T} \right]. \quad (2.56)$$

2.1.5. Teorema de fluctuación-disipación

En la sección anterior se encontró que en el enfoque Langevin, la ecuación de Langevin describe una fuerza aleatoria debido al movimiento térmico de las moléculas que componen el medio circundante y una debido al movimiento disipativo (fricción). En esta sección se deduce uno de los teoremas más importantes de la Física Estadística, el teorema de fluctuación-disipación, el cual como veremos relaciona los efectos de la fuerza aleatoria con aquellos relacionados a la disipación debida a la fricción de la partícula con el medio.

A continuación se exponen brevemente algunos resultados conocidos de la teoría de análisis espectral [27]. Un proceso estocástico $\mathbf{z}(t)$ se puede expandir a través del desarrollo de Fourier

$$\mathbf{z}(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathbf{a}_n e^{i\omega_n t}, \quad (2.57)$$

con las frecuencias

$$\omega_n = \frac{2\pi n}{T}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.58)$$

en cierto intervalo de observación T para $0 \leq t \leq T$. Los coeficientes de Fourier \mathbf{a}_n representan una variable aleatoria definida por

$$\mathbf{a}_n = \frac{1}{T} \int_0^T dt \mathbf{z}(t) e^{-i\omega_n t}, \quad (2.59)$$

además ya que el proceso estocástico se considera pertenece al cuerpo de los números reales, el coeficiente de Fourier es de la forma

$$\mathbf{a}_n = \mathbf{a}'_n + i\mathbf{a}''_n, \quad \mathbf{a}_{-n} = \mathbf{a}^*_n = \mathbf{a}'_n - i\mathbf{a}''_n. \quad (2.60)$$

Se puede obtener la intensidad del coeficiente de Fourier \mathbf{a}_n sumando el promedio del valor absoluto al cuadrado de las componentes real e imaginaria

$$\langle |\mathbf{a}_n|^2 \rangle = \langle |\mathbf{a}'_n|^2 \rangle + \langle |\mathbf{a}''_n|^2 \rangle. \quad (2.61)$$

Si se seleccionan solamente las frecuencias en cierto intervalo $\Delta\omega$, las intensidades de las componentes de Fourier son observables utilizando un filtro adecuado. Así la intensidad o potencia promedio es

$$S_{\mathbf{z}}(\omega) \Delta\omega = \sum_{\omega_n \subset \Delta\omega} \langle |\mathbf{a}_n|^2 \rangle, \quad (2.62)$$

donde el número de modos o frecuencias en la banda de frecuencia $\Delta\omega$ es

$$\frac{\Delta\omega}{2\pi/T} = \frac{T}{2\pi} \Delta\omega. \quad (2.63)$$

Finalmente, suponiendo que el promedio cuadrático medio sea continuo en la frecuencia ω_n , podemos definir el espectro de intensidad ó potencia correspondiente al proceso $\mathbf{z}(t)$ a la frecuencia ω

$$S_{\mathbf{z}}(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{T}{2\pi} \langle |\mathbf{a}_n|^2 \rangle, \quad (2.64)$$

el cual conecta directamente con la transformada de Fourier de la función de autocorrelación del proceso en cuestión a través del teorema de Wiener-Khintchine:

$$S_{\mathbf{z}}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle z(t_0) z(t_0 + t) \rangle e^{-i\omega t}. \quad (2.65)$$

En todas las ecuaciones de Langevin tratadas hasta ahora se ha supuesto que el ruido cumple con las propiedades estadísticas del llamado ruido blanco gaussiano, por ejemplo las ecuaciones (2.8) y (2.9). En estos casos se supone por ejemplo que la partícula browniana es mucho más pesada que las partículas en el medio, sin embargo, el movimiento browniano puede abarcar otro tipo de aspectos más generales donde visto en un sentido amplio se refiere al movimiento fluctuante de un modo en cierto sistema dinámico macroscópico que puede contener un gran número de grados de libertad o partículas. Si se consideran estos casos la suposición de ruido blanco gaussiano ya no es válida para el proceso de la fuerza aleatoria $\mathbf{\Gamma}(t)$ [28] lo cual

queda de manifiesto utilizando ahora una fricción retardada a diferencia del valor constante γ asociado anteriormente con la velocidad instantánea de la partícula.

Tomando en cuenta esta fricción retardada podemos escribir una ecuación de Langevin generalizada

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = - \int_{-\infty}^t dt' \gamma(t-t') \mathbf{v}(t') + \frac{\mathbf{\Gamma}(t)}{m}, \quad (2.66)$$

que por ser lineal podemos utilizar el análisis de Fourier. En general la transformada de Fourier de la n -ésima derivada está dada por

$$\mathcal{F} \left\{ \frac{d^n}{dt^n} \mathbf{x}(t) \right\} = (i\omega)^n \tilde{\mathbf{x}}(\omega). \quad (2.67)$$

Los procesos de la fuerza aleatoria $\mathbf{\Gamma}(t)$ y la velocidad $\mathbf{v}(t)$ se pueden expresar como

$$\mathbf{\Gamma}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \mathbf{\Gamma}(\omega) e^{i\omega t}, \quad (2.68)$$

$$\mathbf{v}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \mathbf{v}(\omega) e^{i\omega t}, \quad (2.69)$$

donde $\mathbf{\Gamma}(\omega)$ y $\mathbf{v}(\omega)$ son los respectivos coeficientes de Fourier. Tomando la transformada de Fourier de la ecuación de Langevin generalizada se obtiene una relación en términos de los coeficientes de Fourier (2.59) correspondientes a cada proceso

$$\tilde{\mathbf{v}}(\omega) = \frac{1}{i\omega + \tilde{\gamma}(\omega)} \frac{\tilde{\mathbf{\Gamma}}(\omega)}{m}, \quad (2.70)$$

y si suponemos que la fricción es una función par $\gamma(t) = \gamma(-t)$, la expresión anterior se puede escribir como

$$\tilde{\mathbf{v}}(\omega) = \frac{1}{i\omega + \gamma[\omega]} \frac{\tilde{\mathbf{\Gamma}}(\omega)}{m}, \quad (2.71)$$

con

$$\gamma[\omega] = \int_0^{\infty} dt \gamma(t) e^{-i\omega t}, \quad (2.72)$$

donde los límites de integración de 0 a ∞ denotan una transformada de Fourier-Laplace en adelante referida mediante los corchetes. La tilde superior en los coeficientes de Fourier representa el hecho de que son las transformadas de Fourier de sus respectivos procesos. De la ecuación (2.70) se puede obtener el espectro de intensidad correspondiente a cada proceso, ésto tomando en

cuenta que los procesos de la fuerza y la velocidad son estacionarios en un tiempo lo suficientemente grande, de este modo se puede utilizar la definición (2.64), obteniendo

$$S_v(\omega) = \frac{1}{m^2} \frac{S_\Gamma(\omega)}{|\omega + \gamma[\omega]|^2}. \quad (2.73)$$

La intensidad espectral $S_\Gamma(\omega)$ debe cumplir cierto requerimiento para satisfacer la representación de una distribución de velocidades en equilibrio térmico. En el caso más simple con ruido blanco gaussiano se sabe que

$$\langle v^2 \rangle = \frac{\pi S_\Gamma}{m^2 \gamma}, \quad (2.74)$$

expresión que se relaciona con la temperatura a través de la ley de equipartición

$$m \langle v^2 \rangle = k_B T, \quad (2.75)$$

es decir

$$S_\Gamma = \frac{m \gamma k_B T}{\pi}, \quad (2.76)$$

donde esta última ecuación se puede generalizar para el presente caso como

$$S_\Gamma(\omega) = \frac{m k_B T}{\pi} \text{Re} \{ \gamma[\omega] \}. \quad (2.77)$$

Con esta última expresión se puede utilizar el teorema de Wiener-Khintchine

$$S_\Gamma(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \phi_\Gamma(t) e^{-i\omega t}, \quad (2.78)$$

e inversamente

$$\phi_\Gamma(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega S_\Gamma(\omega) e^{i\omega t}, \quad (2.79)$$

donde ϕ_Γ se refiere a la función de autocorrelación del proceso de la fuerza

$$\phi_\Gamma(t) = \langle \Gamma(t) \Gamma(t') \rangle. \quad (2.80)$$

Sustituyendo (2.77) en (2.79) se tiene

$$\langle \Gamma(\omega) \Gamma^*(\omega') \rangle = \frac{m k_B T}{\pi} \text{Re} \{ \tilde{\gamma}[\omega] \delta(\omega - \omega') \}. \quad (2.81)$$

Ahora, dado que el espectro de intensidad debe ser positivo se requiere

$$\text{Re} \{ \gamma[\omega] \} \geq 0, \quad (2.82)$$

además como se mencionó con anterioridad, dada la paridad de la función de fricción se puede considerar que

$$\operatorname{Re} \{ \tilde{\gamma} [\omega] \} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dt \gamma(t) e^{-i\omega t}. \quad (2.83)$$

Por lo tanto se obtiene que la función de autocorrelación del proceso correspondiente a la fuerza aleatoria es

$$\langle \Gamma(t) \Gamma(t') \rangle = mk_B T \gamma(t - t'). \quad (2.84)$$

Para la función de autocorrelación de la velocidad se sigue un procedimiento similar, utilizando el teorema de Wiener-Khintchine y sustituyendo en el análogo de (2.79) las expresiones para las intensidades espectrales (2.73) y (2.77), se obtiene la siguiente expresión

$$\langle \mathbf{v}(t) \mathbf{v}(t') \rangle = \frac{k_B T}{2\pi m} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left(\frac{1}{i\omega + \gamma[\omega]} + \frac{1}{-i\omega + \gamma^*[\omega]} \right) e^{i\omega t}, \quad (2.85)$$

donde se puede demostrar que el segundo término en el miembro derecho es igual a cero para $t > 0$, por lo que

$$\langle \mathbf{v}(t) \mathbf{v}(t') \rangle = \frac{k_B T}{2\pi m} \int_{-\infty - i\varepsilon}^{\infty + i\varepsilon} d\omega \frac{e^{i\omega t}}{i\omega + \gamma[\omega]}, \quad (2.86)$$

la cual puede resolverse integrando sobre la trayectoria adecuada. Para obtener una expresión adecuada del teorema de fluctuación-disipación esto no es necesario. Si definimos la movilidad (o admitancia compleja) como

$$\tilde{\mu}(\omega) = \frac{1}{m} \frac{1}{i\omega + \gamma[\omega]}, \quad (2.87)$$

podemos tomar la transformación inversa de (2.86) obteniendo

$$\tilde{\mu}(\omega) = \frac{1}{k_B T} \int_0^{\infty} dt \langle \mathbf{v}(t) \mathbf{v}(t') \rangle e^{-i\omega t}, \quad (2.88)$$

y en analogía la ecuación (2.84) se puede escribir como

$$m\gamma[\omega] = \frac{1}{k_B T} \int_0^{\infty} dt \langle \Gamma(t) \Gamma(t') \rangle e^{-i\omega t}, \quad (2.89)$$

la dos expresiones anteriores son conocidas como teorema de fluctuación-disipación del primer y segundo tipo, respectivamente. En ambos casos se relaciona la respuesta (admitancia/movilidad $\tilde{\mu}(\omega)$ ó impedancia/fricción $\gamma[\omega]$)

de cierto sistema a una perturbación externa con las fluctuaciones térmicas generadas de manera espontánea en dicho sistema expresadas en forma de la autocorrelación de los procesos de velocidad y fuerza.

La relación de Einstein-Sutherland (2.16) es simplemente un caso especial del teorema de fluctuación-disipación. Un proceso difusivo está relacionado con el desplazamiento en cierto medio de concentración no uniforme de partículas coloidales, caracterizado por la constante de difusión

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2t} \langle |x(t) - x(0)|^2 \rangle. \quad (2.90)$$

Ya que

$$x(t) - x(0) = \int_0^t dt' v(t'), \quad (2.91)$$

entonces (2.90) se puede escribir como

$$\begin{aligned} D &= \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2t} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \langle v(t_1) v(t_2) \rangle \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t dt_1 \int_0^{t-t_1} dt' \langle v(t_1) v(t_1 + t') \rangle \\ &= \int_0^\infty dt \langle v(t) v(t') \rangle, \end{aligned} \quad (2.92)$$

suponiendo que

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle v(t) v(t') \rangle = 0. \quad (2.93)$$

Por último, sustituyendo en la ecuación anterior el teorema de fluctuación-disipación del primer tipo se obtiene directamente

$$D_x = \mu k_B T = \frac{k_B T}{\gamma}, \quad (2.94)$$

el subíndice x da cuenta de que a su vez dicha expresión corresponde a la amplitud del ruido para una ecuación de Langevin sobreamortiguada en la coordenada de las posiciones. Siguiendo un procedimiento análogo ahora para la coordenada de velocidades y momentos se obtendría

$$D_p = D_v m^2 = k_B T \gamma. \quad (2.95)$$

2.1.6. Equilibrio local

En este trabajo se trata de establecer cierta equivalencia entre el movimiento browniano pasivo que se lleva a cabo en un medio inhomogéneo y aquél que pudiera observarse en un tipo particular de dinámica activa, a saber «run-and-tumble». Por supuesto es importante establecer qué se quiere decir con dicha inhomogeneidad y aún más cómo se expresa y fundamenta su tratamiento. Aquí se interpreta inhomogeneidad como la variación espacial de las propiedades del medio e.g., $T(x)$ o las propiedades dinámicas en el mismo (e.g., $\mu(x), \gamma(x)$). Pues bien, en efecto la Termodinámica de no-equilibrio lidia con estos casos utilizando el concepto de equilibrio local, el cual establece que las relaciones termodinámicas son válidas para todas las variables termodinámicas asignadas a un elemento de volumen [29]. Dado el caso de un sistema en el que suponemos equilibrio local, lo que se tiene es una teoría en la que las variables termodinámicas intensivas se reemplazan por funciones de la posición \mathbf{r} y el tiempo t , es decir

$$T = T(\mathbf{r}, t), \quad P = P(\mathbf{r}, t), \quad (2.96)$$

y las variables extensivas por densidades para la entropía, energía y número de componentes, respectivamente

$$s(\mathbf{r}, t), \quad (2.97)$$

$$e(\mathbf{r}, t), \quad (2.98)$$

$$n_k(\mathbf{r}, t). \quad (2.99)$$

De esta manera se puede ver al sistema como un todo constituido por una colección de subsistemas que interactúan entre sí caracterizados por diferentes valores en sus propiedades. La validez de la suposición de equilibrio local se puede referir en relación a la temperatura; en Mecánica Estadística, un sistema en equilibrio termodinámico queda descrito por la distribución de velocidades Maxwelliana, en la cual aparece una temperatura bien definida, a saber

$$P(\mathbf{v}) d^3\mathbf{v} = \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{m}{2k_B T} v^2} d^3\mathbf{v}. \quad (2.100)$$

Esta temperatura homogénea caracteriza el baño térmico en que se encuentran embebidas las partículas o moléculas que tienen dicha distribución de velocidades. Por ejemplo, en el caso ordinario de movimiento browniano el medio en el que se encuentra embebida la partícula se encuentra en equilibrio termodinámico ya que podemos asignarle una temperatura efectiva homogénea al baño que la rodea, donde el término «efectivo» se refiere a

que esta cantidad es equivalente al efecto que tiene la temperatura del baño térmico en una partícula browniana pasiva ordinaria. Prigogine [30], ofrece un análisis de ciertos sistemas fuera de equilibrio que pueden cumplir dicha suposición de localidad refiriendo a que todos ellos siempre pueden ser descritos mediante la fórmula de Gibbs o descripción entrópica del sistema

$$ds = \frac{1}{T}de - \frac{P}{T}dv + \sum_r \frac{\mu}{T}dX_r. \quad (2.101)$$

Los párrafos anteriores nos sitúan en el contexto del concepto de equilibrio local el cual se utilizará en el desarrollo del presente trabajo debido a que a lo largo del mismo las cantidades dependientes de la posición cobran especial relevancia. A diferencia del caso pasivo ordinario en el cual se puede identificar una temperatura homogénea del medio, se ha extendido el análisis confiriendo al medio circundante inhomogeneidad en sus propiedades, es decir, dicho medio ya no tiene una temperatura homogénea ni la movilidad en él lo es, variando ambas de manera espacial.

En esta dirección van Kampen [31] propone un modelo difusivo para una partícula browniana en un medio inhomogéneo no isotérmico, la cual puede ser descrita por una ecuación de Smoluchowski que a diferencia de (2.53), en ésta tanto la difusión (o temperatura) así como la movilidad en la misma varían con la posición. Dicha ecuación se puede deducir formalmente a partir la ecuación de Klein-Kramers que análogamente toma en cuenta dicha inhomogeneidad del medio a través de una temperatura y coeficiente de fricción dependientes de la posición. Agregando dichas dependencias espaciales tenemos que (2.48) se puede expresar como

$$\frac{\partial P(x, v, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial P}{\partial x} + U'(x) \frac{\partial P}{\partial v} + \gamma(x) \frac{\partial v P}{\partial v} + D_v(x) \frac{\partial^2 P}{\partial v^2}, \quad (2.102)$$

y de la expresión para el teorema de Fluctuación-Disipación (2.95) con dependencia espacial

$$D_v(x) = k_B T(x) \gamma(x), \quad (2.103)$$

se tiene

$$\frac{\partial P(x, v, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial P}{\partial x} + U'(x) \frac{\partial P}{\partial v} + \gamma(x) \frac{\partial}{\partial v} \left[vP + k_B T(x) \frac{\partial P}{\partial v} \right]. \quad (2.104)$$

En adelante sin perder generalidad se supondrá $k_B = 1$ por simplicidad en el desarrollo. La ecuación anterior se puede reescribir como

$$\frac{\partial}{\partial v} \left[vP + T(x) \frac{\partial P}{\partial v} \right] = \frac{1}{\gamma} \left[\frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x} - U'(x) \frac{\partial}{\partial v} \right] P, \quad (2.105)$$

la cual se resolverá mediante la expansión de la densidad de probabilidad en potencias de γ^{-n} , es decir

$$P(x, v, t) = P^{(0)} + \gamma^{-1}P^{(1)} + \gamma^{-2}P^{(2)} + \dots, \quad (2.106)$$

satisfaciendo dicha ecuación en cada orden de γ^{-1} . Los términos de orden γ^0 satisfacen

$$\frac{\partial}{\partial v} \left[vP^{(0)} + T(x) \frac{\partial P^{(0)}}{\partial v} \right] = 0, \quad (2.107)$$

la cual se puede resolver sin tomar en cuenta aquellas soluciones que permanecen para $|v| \rightarrow \infty$. Si se toma

$$P^{(0)}(x, v, t) = e^{-\frac{v^2}{2T}} f(x, t), \quad (2.108)$$

siendo f una función arbitraria. Los términos γ^{-1} satisfacen

$$\frac{\partial P^{(0)}}{\partial t} + v \frac{\partial P^{(0)}}{\partial x} - U'(x) \frac{\partial P^{(0)}}{\partial v} = \gamma(x) \frac{\partial}{\partial v} \left[vP^{(1)} + k_B T(x) \frac{\partial P^{(1)}}{\partial v} \right], \quad (2.109)$$

donde uno puede sustituir (2.108), obteniendo

$$\gamma(x) \left\{ \frac{\partial}{\partial v} v + T(x) \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right\} P^{(1)} = \left[\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} + U'(x) f \frac{v}{T(x)} \right] e^{-\frac{v^2}{2T}}, \quad (2.110)$$

la cual debe resolverse para $P^{(1)}$. Integrando esta última expresión en v se tiene

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = 0. \quad (2.111)$$

Por tanto, la integrabilidad de (2.110) implica que f es independiente del tiempo así como $P^{(0)}$. Asimismo, (2.110) se puede reescribir como

$$e^{-\frac{v^2}{2T}} \left[v f' + \frac{v^2}{2T^2} T' f + \frac{v}{T} U' f \right] = \gamma T \frac{\partial}{\partial v} e^{-\frac{v^2}{2T}} \frac{\partial}{\partial v} e^{-\frac{v^2}{2T}} P^{(1)}. \quad (2.112)$$

La solución para $P^{(1)}$ se puede expresar mediante el ansatz

$$P^{(1)}(x, v, t) = [v\phi(x, t) + v^3\psi(x, t)] e^{-\frac{v^2}{2T}}, \quad (2.113)$$

con ψ y ϕ dados por

$$\psi(x) = -\frac{T'}{6\gamma T^2} f, \quad (2.114)$$

$$\phi(x) = -\frac{(Tf)' + U'f}{\gamma T}. \quad (2.115)$$

Para tener una solución general dependiente del tiempo se añade el término $g(x, t)$

$$P^{(1)}(x, v, t) = [v\phi(x) + v^3\psi(x) + g(x, t)] e^{-\frac{v^2}{2T}}. \quad (2.116)$$

Para los términos de orden γ^{-2} se puede obtener una ecuación análoga a (2.110) para $P^{(2)}$ sustituyendo ahora la solución (2.113). De nuevo el integrar con respecto a v produce la condición de integrabilidad

$$\int dv \left[\frac{\partial P^{(1)}}{\partial t} + v \frac{\partial P^{(1)}}{\partial x} - U'(x) \frac{\partial P^{(1)}}{\partial v} \right] = 0. \quad (2.117)$$

Esta ecuación se puede escribir como

$$\frac{\partial}{\partial t} \int dv P^{(1)} = -\frac{\partial}{\partial x} \int dv v P^{(1)}(x, v), \quad (2.118)$$

donde, sustituyendo (2.113)

$$\frac{\partial}{\partial t} \int dv P^{(1)} = -\frac{\partial}{\partial x} \int dv [v^2\phi(x) + v^4\psi(x)] e^{-\frac{v^2}{2T}}, \quad (2.119)$$

se puede resolver la integral cuya solución está dada por

$$\frac{\partial}{\partial t} \int dv P^{(1)} = -\frac{\partial}{\partial x} \sqrt{2\pi T} [T\phi(x) + 3T^2\psi(x)], \quad (2.120)$$

y sustituyendo las expresiones para ψ y ϕ

$$\frac{\partial}{\partial t} \int dv P^{(1)} = -\sqrt{2\pi} \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{\gamma} \left[\frac{\partial}{\partial x} T^{\frac{3}{2}} f + U' T^{\frac{1}{2}} f \right]. \quad (2.121)$$

Como lo que buscamos es una expresión para $P(x, t)$ podemos ahora coleccionar cada término de la expansión e integrarlo con respecto a v

$$\begin{aligned} P(x, t) &= \int dv P^{(0)}(x, v) + \int dv P^{(1)}(x, v, t) + \dots \\ &= \sqrt{2\pi T} f(x) + O\left(\frac{1}{\gamma}\right). \end{aligned} \quad (2.122)$$

Con esto la ecuación (2.117) obtenida para $P^{(1)}$ (condición de integrabilidad) se puede expresar como

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{\gamma(x)} \left[\frac{\partial}{\partial x} T(x) P(x, t) + U'(x) P(x, t) \right]. \quad (2.123)$$

Utilizando el hecho de que $\gamma(x)$ es el recíproco de la movilidad $\mu(x)$

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \mu(x) \left[U'(x) P(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} T(x) P(x, t) \right]. \quad (2.124)$$

La ecuación anterior se puede escribir de dos maneras cuando se incorpora al interior de los corchetes el término de movilidad con dependencia espacial. Si se considera el segundo término como $\mu(x) \frac{\partial}{\partial x} T(x) P(x, t)$ y se desarrolla explícitamente, se tiene

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} [\mu(x) U'(x) + \mu(x) T'(x)] P(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} D_x(x) \frac{\partial P(x, t)}{\partial x}. \quad (2.125)$$

Por el contrario, si la movilidad se añade al interior del operador diferencial, i.e., $\frac{\partial}{\partial x} \mu(x) T(x) P(x, t)$, entonces

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} [\mu(x) U'(x) - \mu'(x) T(x)] P(x, t) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} D_x(x) P(x, t), \quad (2.126)$$

donde se utilizó el hecho de que el teorema de fluctuación-disipación se cumple localmente, esto es

$$D_x(x) = \frac{k_B T(x)}{\gamma(x)} = \mu(x) k_B T(x), \quad (2.127)$$

la cual coincide con la llamada relación de Einstein-Sutherland (2.16), en este caso a nivel local.

En las ecuaciones (2.125) y (2.126) los primeros términos en el miembro derecho son lo que podría tomarse de acuerdo a la estructura de la ecuación como el término de «drift» en una ecuación de Fokker-Planck y de manera particular en este tipo de ecuación de Smoluchowski. Aunque por supuesto este no tiene la forma ortodoxa de la movilidad multiplicada por la fuerza, en lugar de ello aparece un término adicional que se podría relacionar a un potencial térmico en (2.125) y otro más controversial en (2.126). En el caso del segundo término (difusivo) se tienen también dos opciones, siendo ambas discutidas por el texto clásico de van Kampen [32], en el que se concluye que ambas pueden ser correctas dependiendo del sistema físico en particular.

Por otro lado, como se verá en el siguiente capítulo, en este trabajo se considera para el caso de movimiento activo que la movilidad de la partícula no depende del espacio, siendo constante. En este sentido se han escrito varios artículos, los cuales consideran un medio no isotérmico donde la movilidad es constante [33]. Desde el enfoque Fokker-Planck se ha derivado rigurosamente una ecuación de Smoluchowski (régimen sobreamortiguado)

para partículas brownianas en un medio no isotérmico [34]. Asimismo desde el enfoque Langevin también se ha derivado este régimen tomando en cuenta dicha consideración [35]. Cabe mencionar que dichos estudios se hicieron con el motivo de dirimir la cuestión que se presenta precisamente en el caso en que la amplitud del ruido presenta dependencia espacial. En este contexto surge el dilema de Itô-Stratonovich, el cual plantea que dependiendo de la prescripción para evaluar el valor que debe tomar x en dicha amplitud del ruido dependiendo espacialmente, se obtienen dos ecuaciones de Smoluchowski ligeramente distintas al tomar alguna de las dos prescripciones clásicas para resolver ecuaciones diferenciales estocásticas: Itô ó Stratonovich.

Utilizando un método perturbativo similar al empleado por van Kampen y una posterior renormalización a través del método de grupo de renormalización, Matsuo derivó la siguiente ecuación de Smoluchowski para el caso de una partícula browniana difundiéndose en un medio no isotérmico con movilidad constante

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \mu \frac{\partial}{\partial x} \left[U'(x) P(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} T(x) P(x, t) \right], \quad (2.128)$$

la cual es completamente análoga a aquella derivada por van Kampen (ec. 2.124). En este caso es trivial expresarla como la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial J(x, t)}{\partial x}, \quad (2.129)$$

expresada explícitamente como

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[-\mu U'(x) P(x, t) - \mu \frac{\partial}{\partial x} T(x) P(x, t) \right], \quad (2.130)$$

con lo cual queda definida la corriente

$$J(x, t) = -\mu U'(x) P(x, t) - \mu \frac{\partial}{\partial x} T(x) P(x, t). \quad (2.131)$$

Ahora bien, como se mencionó anteriormente estamos interesados en expresiones para movilidad constante, lo cual condiciona el cumplimiento riguroso del teorema de fluctuación-disipación local (ec. 2.127). En el caso de movilidad constante se tendría la expresión análoga

$$D_x(x) = \frac{k_B T(x)}{\gamma} = \mu k_B T(x). \quad (2.132)$$

Esta expresión como tal es discutible en el sentido de que no se puede afirmar que se cumple fluctuación-disipación localmente dado que la movilidad

es constante y por ende desacoplada del término referente a la temperatura local del medio. Sin embargo dejando de lado este acoplamiento local entre la respuesta de la partícula a las perturbaciones hechas por el medio físico, plausiblemente podemos asociar una temperatura $T(x)$ mediante dicha identificación, suponiendo que el sistema no se comporta tan alejado de equilibrio en el sentido de que todavía cumple con una teoría de respuesta lineal del medio.

Con esta identificación (2.131) se puede escribir como

$$J(x, t) = -\mu U'(x) P(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} D(x) P(x, t). \quad (2.133)$$

Se utilizará $\mathcal{V}_{\text{drift}}(x)$ refiriéndose éste al primer término del miembro izquierdo, por tanto se tiene

$$J(x, t) = V_{\text{drift}}(x) P(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} D(x) P(x, t). \quad (2.134)$$

La solución estacionaria a la ecuación de Fokker-Planck (Smoluchowski) encontrada por Matsuo (ec. 2.130) está dada por

$$P_{\text{st}}(x) = \frac{\mathcal{N}(0)}{D(x)} \exp \left\{ \int^x dx' \frac{V_{\text{drift}}(x')}{D(x')} \right\}, \quad (2.135)$$

donde estos términos de difusión/temperatura efectiva podrían depender de la posición debido a varios factores, v.g., la influencia de un potencial externo en el baño térmico. Es importante enfatizar que en esta sección se expusieron desarrollos teóricos utilizados para describir partículas brownianas *pasivas*.

Como se verá en el siguiente capítulo, un tipo de dinámica estocástica propia de partículas que exhiben movimiento activo, a saber, «run-and-tumble», se conecta con el caso pasivo precisamente a través de estos términos de difusión/temperatura dependientes de la posición.

2.2. Movimiento activo

En la sección anterior se presentaron algunos de los resultados más importantes referentes a la dinámica en partículas brownianas pasivas, caracterizadas por encontrarse en contacto con un medio circundante caracterizado por una temperatura homogénea/inhomogénea. En el caso de partículas activas, el influjo de energía adicional tomada del entorno vuelve a éstas un sistema fuera de equilibrio con propiedades diferentes y más complejas en comparación con aquellas encontradas en su contraparte pasiva. Algunas de estas nuevas características son

- Desplazamiento cuadrático medio $\langle \mathbf{r}^2(t) \rangle$ mayor al caso pasivo resultando en propiedades difusivas distintas.
- Distribuciones de velocidad y densidad de probabilidad inusuales alejadas de la gaussianidad.

Estas características por supuesto son consecuencia de esta energía adicional, entonces, ¿cómo agregar esta «actividad» a los modelos dinámicos introducidos para el caso pasivo? Ese ha sido el punto de partida en la mayoría de modelos propuestos cuando de modelar la dinámica individual de partículas brownianas activas se trata. En esta sección se abordan brevemente algunos de estos modelos, todos ellos partiendo de una ecuación diferencial estocástica con alguna adecuación que busca hacer las veces de esta energía extra.

2.2.1. Fricción dependiente de la velocidad

Este modelo como su nombre lo dice está basado en la inclusión a una ecuación de Langevin de un coeficiente de fricción que puede depender de la posición y la velocidad « $\gamma(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ » remitiéndonos solo al caso espacialmente homogéneo, es decir, $\gamma(\mathbf{v})$. Dicho coeficiente evidentemente confiere no linealidad al término disipativo. Las ideas básicas detrás de este modelo fueron formuladas por Helmholtz y Rayleigh [36] en un intento por modelar la entrada de energía a instrumentos musicales y en general a sistemas cuyas partes móviles producen pérdidas de energía compensadas por la inyección de energía mecánica. Discutido ampliamente por Rayleigh en su trabajo Teoría del Sonido, es el ejemplo de las cuerdas de un violín, éstas pierden energía al vibrar pero las oscilaciones se pueden mantener a través de la transferencia de energía del arco hacia la cuerda [36] [37].

Ahora veamos como la no linealidad en el término disipativo sirve como mecanismo para la inclusión de la energía adicional del entorno. Se toman

las ecuaciones de Langevin (2.8) y (2.9), variando solo en el hecho de la dependencia de la velocidad por parte de γ , entonces se tiene

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla U(\mathbf{r}) - \gamma(\mathbf{v})\mathbf{v} + \sqrt{2D}\boldsymbol{\xi}(t), \quad (2.136)$$

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}. \quad (2.137)$$

Por otro lado podemos tomar la expresión usual para la energía cinética

$$E = \frac{1}{2}\mathbf{v}^2 + U(\mathbf{r}), \quad (2.138)$$

cuya derivada con respecto al tiempo es

$$\frac{dE}{dt} = \mathbf{v} \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \nabla U(\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{r}}{dt}, \quad (2.139)$$

donde al sustituir (2.136) y promediar sobre el ruido, se obtiene

$$\frac{d}{dt} \langle E \rangle = -\gamma(\mathbf{v})\mathbf{v}^2 + D, \quad (2.140)$$

de lo cual podemos inferir que valores negativos para el coeficiente de fricción resultan en un incremento de la energía mecánica; es por ello que también se conoce como modelo de *fricción negativa* y es precisamente ésta la representación del influjo de energía adicional a la partícula browniana que se buscaba. Debido a este mecanismo las partículas moviéndose lentamente son aceleradas mientras que las más rápidas se ven amortiguadas. Este mecanismo de bombeo constante es precisamente lo que autopropulsa a la partícula activa en este modelo (ver figura 2.4).

Por supuesto también es posible asociar a (2.136) la ecuación de Fokker-Planck

$$\frac{\partial P(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t | \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t_0)}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial P}{\partial \mathbf{r}} + \nabla U(\mathbf{r}) \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left[\gamma(\mathbf{v})\mathbf{v}P + D \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}} \right], \quad (2.141)$$

cuya distribución de velocidades estacionaria sin fuerzas externas $\nabla U(\mathbf{r}) = 0$, es

$$P_{\text{st}}(\mathbf{v}) = N \exp \left\{ -\frac{1}{D} \int^v d\mathbf{v}' \gamma(\mathbf{v}') \mathbf{v}' \right\} = N \exp \left\{ -\frac{\Phi(\mathbf{v})}{D} \right\}. \quad (2.142)$$

A continuación se describen brevemente dos de los mecanismos de autopropulsión utilizados de manera estándar en el tratamiento de movimiento activo, por supuesto, dichos mecanismos se refieren a expresiones para la fricción dependiente de la velocidad $\gamma(\mathbf{v})$.

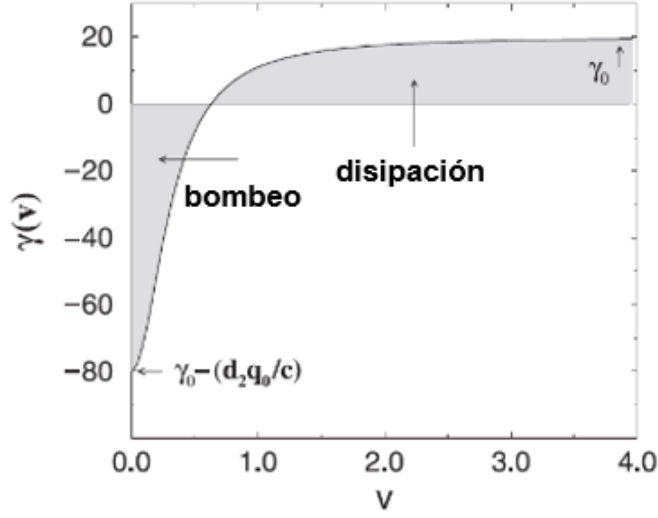


Figura 2.4: Fricción en función de la velocidad. Se observan los estadios de bombeo para el caso $|\gamma(\mathbf{v})| < 0$ y disipación para $|\gamma(\mathbf{v})| > 0$. [3]

Modelo Rayleigh-Helmholtz

Propuesto en un principio para tratar aspectos relacionados con acústica, es considerado el punto de partida en lo que se refiere a los modelos de fricción no lineal [38]; en general se supone un comportamiento parabólico del coeficiente de fricción dado por

$$\gamma(\mathbf{v}) = -\gamma_1 + \gamma_2 \mathbf{v}^2, \quad (2.143)$$

o definiendo una velocidad estacionaria como referencia $v_0^2 = \frac{\gamma_1}{\gamma_2}$

$$\gamma(\mathbf{v}) = \gamma_1 \left(\frac{v^2}{v_0^2} - 1 \right) = \gamma_2 (v^2 - v_0^2). \quad (2.144)$$

Como se puede ver dependiendo de la razón entre la velocidad v de la partícula y una velocidad de referencia v_0 , el comportamiento dinámico de la partícula se alterna entre una fase denominada de «bombeo» de energía, caracterizada porque ésta se mueve a bajas velocidades ($v^2 < v_0^2$), lo cual confiere signo negativo al coeficiente de fricción incrementando su energía cinética y una fase de amortiguamiento cuando ésta se mueve con velocidades mayores ($v^2 > v_0^2$). Utilizando este coeficiente de fricción la distribución de velocidades estacionaria es

$$P_{\text{st}}(\mathbf{v}) = N \exp \left\{ \frac{1}{D} \left(\alpha \frac{\mathbf{v}^2}{2} - \beta \frac{\mathbf{v}^4}{4} \right) \right\}, \quad (2.145)$$

en la cual dependiendo del signo de α se tiene un comportamiento pasivo o activo. Cuando $\alpha < 0$ se tiene el caso pasivo en el que se extrae energía de la partícula contrario al caso de $\alpha > 0$ en el cual se bombea energía a la misma.

Modelo Schienbein-Gruler

Considerado la versión lineal del mecanismo de Helmholtz-Rayleigh e inspirado en experimentos con movimiento celular [39], toma como variable del sistema la rapidez $|\mathbf{v}|$, expresando el coeficiente de fricción como

$$-\gamma(\mathbf{v}) \mathbf{v} = -\gamma_0 (|\mathbf{v}| - v_0) \mathbf{e}_v, \quad (2.146)$$

con lo cual la distribución estacionaria de velocidades es

$$P_{st}(\mathbf{v}) = N \exp \left\{ -\frac{\gamma_0}{2D} (|\mathbf{v}| - v_0)^2 \right\}. \quad (2.147)$$

Siendo una desventaja de este modelo la discontinuidad del término de fricción para $\mathbf{v} = 0$.

2.2.2. Modelo de depósito

En este apartado se expone un modelo más intuitivo que si bien considera a la partícula (browniana) activa capaz de tomar energía del entorno también ésta lo es de almacenar algo de energía en un *depósito interno*, $e(t)$ [37], que sufre modificaciones a través de

1. tomar energía del entorno, siendo $q(\mathbf{r})$ el flujo de energía hacia el depósito,
2. disipación interna proporcional a la energía interna, suponiéndose constante la tasa de energía disipada, c ,
3. conversión interna de energía en movimiento como función de la velocidad de la partícula, siendo $d(\mathbf{v})$ la tasa de conversión de energía interna a cinética.

Estas características dan cuenta de la aplicación de este modelo al movimiento activo en sistemas biológicos en los cuales energía tomada del entorno, por ejemplo a través del alimento en el caso de cierto animal, es disipada a través de procesos metabólicos internos, pudiéndose extender incluso a casos como el tráfico automovilístico añadiendo dependencia en la aceleración $d(\dot{\mathbf{v}})$.

Tomando en cuenta las posibles alteraciones al depósito interno se puede plantear el balance de energía

$$\frac{d}{dt} e(t) = q(\mathbf{r}) - ce(t) - h(\mathbf{v}) e(t), \quad (2.148)$$

con el ansatz

$$q(\mathbf{r}) = q_0 \quad h(\mathbf{v}) = d\mathbf{v}^2. \quad (2.149)$$

Ahora es este depósito el que proporciona aceleración a la partícula browniana activa añadiendo un término adicional $de(t)\mathbf{v}$ a la fuerza disipativa que en el modelo anterior solo contenía el término de fricción, por tanto

$$\mathbf{F}_{diss}(\mathbf{v}) = -\gamma_0\mathbf{v} + de(t)\mathbf{v}, \quad (2.150)$$

con lo que la ecuación de Langevin para este modelo es

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\gamma_0\mathbf{v} + de(t)\mathbf{v} - \nabla U(\mathbf{r}) + \mathcal{F}(t), \quad (2.151)$$

estando acoplada con la ecuación para el depósito de energía (2.148).

Se puede mostrar [36] que la energía perdida por el depósito se convierte completamente en energía cinética tomando la derivada de la energía mecánica del sistema

$$\frac{dE}{dt} = [de(t) - \gamma_0]v^2 + \sqrt{2D}\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi}, \quad (2.152)$$

donde el término $de(t)v^2$ es exactamente el negativo del último término en el balance de energía (2.148).

Si se supone como en la mayoría de los casos un depósito de energía estacionario, es decir, $\frac{d}{dt}e(t) = 0$, se puede eliminar la energía a través de una aproximación adiabática obteniendo una fuerza disipativa efectiva

$$\mathbf{F}_{diss}(\mathbf{v}) = - \left[\gamma_0 - \frac{dq}{c + dv^2} \right] \mathbf{v}, \quad (2.153)$$

y con ello una expresión para un coeficiente de fricción dependiente de la velocidad al igual que en el caso del modelo de fricción no lineal, el cual está dado por

$$\gamma(\mathbf{v}) = \gamma_0 - \frac{dq}{c + dv^2}. \quad (2.154)$$

Si en el coeficiente anterior consideramos que las partículas se mueven a velocidades muy pequeñas ($\mathbf{v}^2 \ll \frac{c}{d}$), se tiene que

$$\gamma(\mathbf{v}) = \left(\gamma_0 - \frac{dq}{c} \right) - \frac{qd}{c^2}v^2 + \mathcal{O}(v^4), \quad (2.155)$$

expresión que nos remite a aquella obtenida para el modelo de Rayleigh-Helmholtz con la correspondencia

$$\gamma_1 = \frac{dq}{\gamma_0} - \gamma_0; \quad \gamma_2 = \frac{qd}{c^2}, \quad (2.156)$$

estableciéndose así una conexión entre el modelo de fricción no lineal y el modelo de depósito interno.

Para concluir este apartado podemos, de manera análoga a los modelos anteriores, obtener una distribución estacionaria para las velocidades tomando la ecuación de Langevin (ec. 2.151) con la fuerza disipativa efectiva (ec. 2.153), obteniendo con ello la ecuación de Fokker-Planck correspondiente cuya solución estacionaria es

$$P_{st}(\mathbf{v}) = \mathcal{N} \left(1 + \frac{d}{c} \mathbf{v}^2 \right)^{\frac{q_0}{2D}} \exp \left[-\frac{\gamma_0}{2D} \mathbf{v}^2 \right]. \quad (2.157)$$

2.3. Dinámica «run-and-tumble»

Los modelos descritos anteriormente abordan el movimiento activo partiendo en términos generales de una ecuación diferencial estocástica (enfoque Ornstein-Uhlenbeck) en la cual se toma ya sea un coeficiente de fricción dependiente de la velocidad o se añade el término de depósito capturando ambos mecanismos la noción de una energía adicional en la forma de una especie de fricción negativa o un depósito que la almacena y transforma en movimiento. Posteriormente se puede trasladar esta ecuación de Langevin a su correspondiente ecuación de Fokker-Planck (enfoque Einstein-Smoluchowski) obteniéndose resultados ahora en términos de la distribución de velocidades. En ambos casos es la velocidad de la partícula la que dicta el tipo de dinámica que ésta sigue, no existiendo así una dependencia explícita del espacio siendo precisamente uno de los aspectos que el modelo «run-and-tumble» sí considera. Este modelo no captura los procesos termodinámicos que involucra la transferencia de energía entre la partícula y el entorno, más bien da cuenta de la dinámica particular que exhiben ciertos organismos, siendo por tanto un enfoque orientado a los patrones en las trayectorias que siguen las partículas activas, enfatizándose el hecho de que este proceso difusivo no es browniano.

Al tratar de representar esta dinámica dependiente del espacio se requiere considerar ciertas características presentes en el movimiento activo tales como

- (i) Longitud de persistencia mayor al caso pasivo.
- (ii) Cambios discontinuos en la dirección durante el proceso difusivo.
- (iii) En algunos casos preferencia por cierta dirección, e.g. movimiento dirigido hacia zonas de mayor o menor concentración de nutrientes (quimiotaxis).

A diferencia del caso pasivo en que la longitud de persistencia, es decir, la distancia que la partícula mantiene cierta dirección, es pequeña debida a los constantes cambios de dirección imprimidos por las colisiones de las moléculas del medio, en el caso activo dicha longitud de persistencia reviste mayor importancia ya que por ejemplo un organismo macroscópico v.g. un mono puede mantener cierta dirección durante un tiempo considerable cambiándola eventualmente debido a la presencia de un depredador; en el caso de la partícula browniana pasiva prácticamente es en todo momento el cambio de dirección ya que las colisiones no cesan. En este sentido podemos remontarnos a los trabajos pioneros de Fürth [40] y Taylor [41] donde sugieren tratar este tipo de sistemas difusivos a través de una caminata aleatoria persistente. Posteriormente Goldstein [42] desarrolla una teoría difusiva basada en movimientos discontinuos, es decir, toma en cuenta estos cambios en la dirección de la partícula planteando con ello la conexión de este tipo de fenómenos con el bien conocido proceso del telégrafo [43] a tratar a continuación.

En una dimensión se tiene

$$\frac{\partial P_R(x, t)}{\partial t} = -c(x, t) \frac{\partial P_R(x, t)}{\partial x} + \frac{1}{2T} [P_L(x, t) - P_R(x, t)], \quad (2.158)$$

$$\frac{\partial P_L(x, t)}{\partial t} = c(x, t) \frac{\partial P_L(x, t)}{\partial x} + \frac{1}{2T} [P_R(x, t) - P_L(x, t)], \quad (2.159)$$

donde $P_{R,L}$ se refieren a las probabilidades de movimiento de las partículas a la derecha e izquierda, respectivamente. El sistema anterior de ecuaciones se puede escribir en la forma de una ecuación diferencial parcial de segundo orden tomando en cuenta que ahora se utilizará como variable dependiente la suma de las distribuciones de probabilidad derecha e izquierda

$$P(x, t) = P_R(x, t) + P_L(x, t). \quad (2.160)$$

Por tanto

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{c(x, t)} \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} \right] + \frac{1}{Tc(x, t)} \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[c(x, t) \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} \right]. \quad (2.161)$$

Con $c(x, t) = c$ se obtiene la ecuación del telégrafo

$$\frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial t^2} + \frac{1}{T} \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = c^2 \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}, \quad (2.162)$$

la cual se puede tomar como una generalización de la ecuación de difusión ordinaria

$$\frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial t^2} = D^2 \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}. \quad (2.163)$$

Matemáticamente el modelo «run-and-tumble» se encuentra conectado a las ecuaciones (2.158) y (2.159) las cuales describen un proceso telegráfico generalizado. Ahora bien, ¿qué tipo de partícula activa exhibe una dinámica con estas características de persistencia y difusión discontinua? Desde el punto de vista fenomenológico el modelo run-and-tumble tiene su inspiración en el movimiento observado en bacterias, siendo el ejemplo paradigmático la bacteria *Escherichia coli* (*E. coli*), organismo unicelular con filamentos flagelares externos.

Ahora cabría la pregunta: ¿por qué esta bacteria en particular? Pues bien, desde su descubrimiento en 1885 por el pediatra alemán Theodor Scherich, demostró ser candidata ideal para llevar a cabo estudios a nivel de fisiología bacteriana. De acuerdo a la referencia básica de Berg [4] quien ha estudiado a profundidad dicha bacteria podríamos entender su importancia con base en los siguientes aspectos:

- **Herencia.**- Las bacterias llevan miles de millones de años en la Tierra, por lo que varias de sus estrategias de adaptación y supervivencia se transmitieron a nosotros, ejemplo de ello son los mecanismos a nivel celular para tomar energía del entorno.
- **Tamaño y forma.**- Su tamaño del orden de $2.5 \mu m$ de largo y un diámetro de $0.8 \mu m$ las convierte por supuesto en entes muy pequeños a nivel biológico con lo cual el estudio de sus características dinámicas y termodinámicas nos brinda conocimiento acerca de lo que podrían ser dispositivos artificiales que emularan dichas características.
- **Hábitat.**- Si bien el lugar donde éstas viven de manera más cómoda es por lo general en los intestinos de la mayoría de animales, incluido el ser humano, a diferencia de otras bacterias que son anaerobias y por ende viven estrictamente en ambientes libres de oxígeno, bacterias como la *E. coli* pueden hacerlo también en entornos aerobios facilitando con ello su estudio.
- **Simpleza.**- Por lo general cuando se busca extraer la esencia de un problema se comienza por el caso más simple y esto se aplica perfectamente a las características bacterianas, siendo organismos unicelulares y relativamente más fáciles de tratar.

- **Patogenicidad.**- La mayoría de las cepas de *E. Coli* no afectan al ser humano, siendo parte esencial de la flora intestinal que protege contra otros agentes perjudiciales. Por tanto su trato a nivel experimental no resulta particularmente peligroso.
- **Comportamiento motil.**- Sin duda el aspecto más importante que concierne a este trabajo, su metabolismo, movimiento y la manera de explorar su entorno espacialmente son características del movimiento activo y por ende de un sistema intrínsecamente fuera de equilibrio. Comprender su dinámica tiene un papel preponderante en el entendimiento del movimiento de organismos autopropulsados tanto en lo individual como en lo colectivo.

En resumen, *E. Coli*, es una bacteria que aunque relativamente simple engloba bastantes aspectos esenciales si se estudia a profundidad además de ser fácil de tratar con relación a otros microorganismos. Si bien aquí nos avocaremos a su importancia como inspiración del modelo «run-and-tumble» y las características del mismo, esta bacteria tiene un papel protagónico en estudios de síntesis protéica, regulación y expresión genética, genética viral y bacteriana y manufactura de proteínas con valor comercial, entre otros.

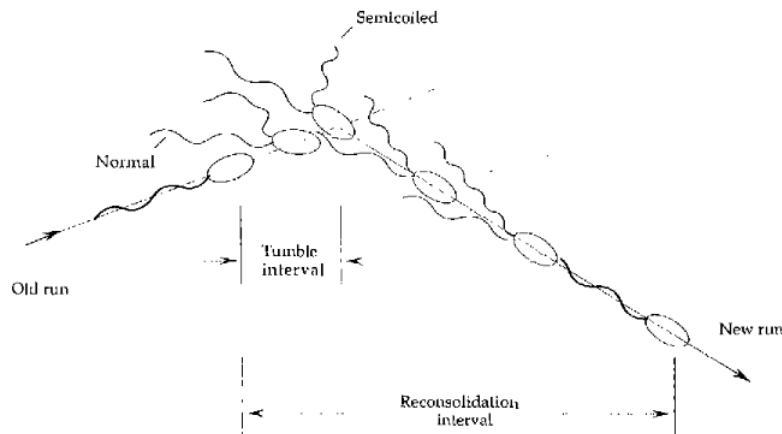


Figura 2.5: Dibujo esquemático de la secuencia de eventos durante un viraje («tumble»). En este caso la bacteria con dos filamentos cambia su dirección debido a la rotación de uno de ellos.[4]

Ahora bien, ¿en qué consiste el movimiento de esta bacteria? Se pueden apreciar dos etapas que se suceden y repiten: La primera, denominada «run», consiste en una sincronización filamentaria que impulsa a la bacte-

ria en una trayectoria que para fines prácticos podríamos tomar como recta, presentándose pequeñas desviaciones despreciables debidas a movimiento browniano rotacional. La segunda, «tumble», es causada por eventos intracelulares estocásticos, los cuales varían la orientación de algunos filamentos que rotan a la bacteria y por tanto cambian su dirección como se ilustra en la figura 2.5. La combinación alternada de ambos procesos provoca que la partícula lleve a cabo una exploración espacial difusiva *no térmica*.



Figura 2.6: Trayectorias del tipo «run-and-tumble» seguidas por *E. Coli* vistas en un plano. Nótese el movimiento más persistente a diferencia del caso Browniano pasivo.[4]

Si bien, existe una velocidad constante (autopropulsión), esta puede verse influida por potenciales externos. Además este modelo ha sido utilizado para describir el fenómeno de quimiotaxis por el cual el desplazamiento de las bacterias se da en función de la consecución de nutrientes del entorno, estando estos en mayor o menor concentración en el paisaje inmediato de la partícula. Por supuesto los puntos de mayor concentración de nutrientes atraen a la bacteria mientras que los de menor concentración repelen a la misma. Esto confiere cierto direccionamiento a la partícula restando aleatoriedad al movimiento de la misma (figura 2.7).

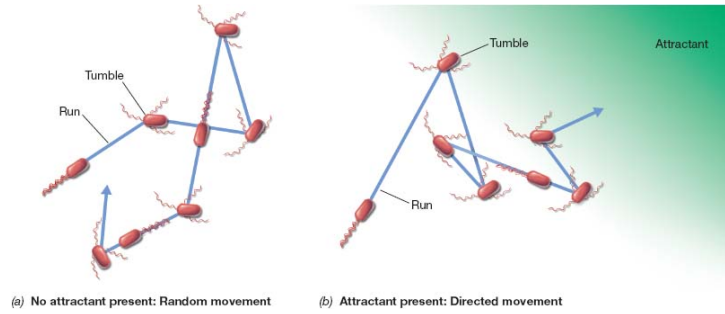


Figura 2.7: Trayectorias «run-and-tumble» en un plano. En la mitad izquierda las bacterias no se encuentran sometidas a un potencial siendo aleatorio su movimiento, en la mitad derecha su dinámica se encuentra influida por un potencial del tipo quimiotáctico. [5]

De manera particular en este trabajo se tratará el caso más simple en que la bacteria (partícula activa) se desplaza sólo en una dimensión, es decir, sólo puede moverse en las direcciones derecha (R) o izquierda (L). La bacteria se mueve con rapidez dependientes del espacio $v_{R,L}(x)$. El cambio de dirección está dado por la tasa de «tumbling» $\alpha_{R,L}(x)$ en ambas direcciones, donde la dependencia espacial da cuenta de cierta preferencia en la dirección modelando un desplazamiento quimiotáctico. El modelo se puede resumir en la figura 2.8.

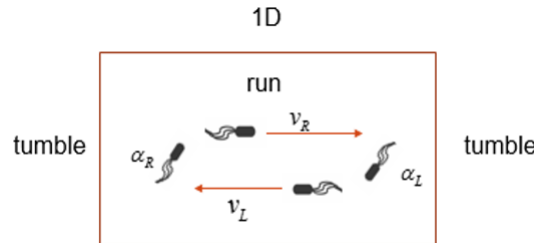


Figura 2.8: Modelo «run-and-tumble» unidimensional.

Schnitzer plantea en su trabajo seminal sobre caminatas aleatorias continuas aplicadas a quimiotaxis [44] las siguientes ecuaciones que describen la dinámica «run-and-tumble» en una dimensión.

$$\frac{\partial P_R(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} v_R(x) P_R(x,t) - \frac{\alpha_R(x) P_R(x,t)}{2} + \frac{\alpha_L(x) P_L(x,t)}{2}, \quad (2.164)$$

$$\frac{\partial P_L(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} v_L(x) P_L(x,t) + \frac{\alpha_R(x) P_R(x,t)}{2} - \frac{\alpha_L(x) P_L(x,t)}{2}. \quad (2.165)$$

Las ecuaciones anteriores tienen la misma forma que el sistema para el proceso telegráfico (2.158) y (2.159), excepto por un término proveniente del hecho de que en este caso $v_{R,L}(x)$ se encuentra dentro del operador derivada.

La primera ecuación, (2.164), nos da la tasa de cambio del número de partículas que se mueven a la derecha en cualquier punto del espacio, siendo lo mismo para (2.165) sólo que a la izquierda. Los primeros términos del lado derecho en ambas nos dan cuenta de las inhomogeneidades espaciales de partículas que se mueven a la derecha o a la izquierda, mientras que los segundos y terceros términos se refieren a las probabilidades de que las partículas cambien su dirección a la derecha o a la izquierda. Nótese que en ambos casos la dirección del movimiento está implícita en los signos de los términos a la izquierda.

Sumando (2.164) y (2.165), directamente se puede obtener la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial J(x, t)}{\partial x}, \quad (2.166)$$

definiendo con ello la densidad de probabilidad de grano grueso (en el sentido de que se distinguen las probabilidades de movimiento a un lado u otro), así

$$P(x, t) \equiv P_R(x, t) + P_L(x, t), \quad (2.167)$$

la cual nos da la probabilidad de encontrar a la partícula en la posición x al tiempo t sin importar la dirección en el movimiento de la misma. Asimismo se define la función de corriente

$$J(x, t) \equiv v_R(x) P_R(x, t) - v_L P_L(x, t). \quad (2.168)$$

Esta función de corriente al derivarse con respecto al tiempo cumple dinámicamente

$$\begin{aligned} \frac{\partial J(x, t)}{\partial t} + \frac{(\alpha_R + \alpha_L)}{2} J(x, t) = \\ -v_R \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{v_R}{v_R + v_L} J(x, t) \right] + v_L \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{v_L}{v_R + v_L} J(x, t) \right] \\ - (v_R + v_L) \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{v_R v_L}{v_R + v_L} J(x, t) \right] + \frac{\alpha_L v_R - \alpha_R v_L}{2} P(x, t), \end{aligned} \quad (2.169)$$

donde para el caso estacionario se tiene

$$J_{st} = \frac{\frac{1}{2} (\alpha_L v_R - \alpha_R v_L) P_{st}(x) - (v_R + v_L) \frac{d}{dx} \left[\left(\frac{v_R v_L}{v_R + v_L} \right) P_{st}(x) \right]}{\frac{1}{2} (\alpha_R + \alpha_L) + \frac{v_L v'_R - v_R v'_L}{v_R + v_L}}. \quad (2.170)$$

Simplificando más la situación, se pueden obtener soluciones de «equilibrio», por supuesto no en el sentido termodinámico sino referidas en este caso al hecho de que la corriente es nula $J_{\text{st}} = 0$. Con esta condición las soluciones satisfacen la ecuación diferencial ordinaria

$$\frac{d}{dx} \left[\left(\frac{v_R v_L}{v_R + v_L} \right) P_{\text{eq}}(x) \right] = \frac{\alpha_L v_R - \alpha_R v_L}{2v_R v_L} \left[\left(\frac{v_R v_L}{v_R + v_L} \right) P_{\text{eq}}(x) \right], \quad (2.171)$$

cuya solución se obtiene trivialmente, siendo

$$P_{\text{eq}}(x) = P(x_0) \left[\frac{v_R(x_0) v_L(x_0)}{v_R(x) v_L(x)} \right] \left[\frac{v_R(x) + v_L(x)}{v_R(x_0) + v_L(x_0)} \right] \exp \left[\int_{x_0}^x \frac{\alpha_L(x') v_R(x') - \alpha_R(x') v_L(x')}{2v_R(x') v_L(x')} dx' \right], \quad (2.172)$$

donde x_0 se refiere a un punto de referencia en el sistema, siendo adoptada la convención $x_0 = 0$ por conveniencia dada la simetría de los potenciales confinantes de la partícula.

En el siguiente capítulo se continúa el desarrollo anterior dando expresiones explícitas a las rapideces $v_{R,L}$ y las tasas de cambio $\alpha_{R,L}$ relacionándolas a un potencial externo que determina la zona de movimiento de las partículas.

Capítulo 3

Difusión efectiva e inhomogeneidad

Como se ha visto en el capítulo anterior, el movimiento activo posee características distintas a aquéllas del caso pasivo ordinario, sin embargo, en este trabajo se pretende explorar qué tan alejados están ambos comportamientos y si bajo ciertas condiciones ambos podrían mostrar las mismas características difusivas. En este capítulo se plantean las bases de este enfoque y se aplica a ciertos potenciales característicos. El presente desarrollo trata con partículas activas v.g., una bacteria sin interacción con otras bacterias (límite diluido), desplazándose en una dimensión con los movimientos posibles de derecha e izquierda y en adición bajo la influencia de un potencial externo debido a una fuerza conservativa.

3.1. Conexión entre caso pasivo y activo: difusión efectiva

Retomemos la ecuación (2.169), en ésta podemos encontrar los siguientes términos

$$v_R(x) + v_L(x), \quad (3.1)$$

y

$$\frac{v_R(x) v_L(x)}{v_R(x) + v_L(x)}, \quad (3.2)$$

así como

$$\frac{\alpha_R(x) + \alpha_L(x)}{2}. \quad (3.3)$$

En el caso de (3.1) y (3.2), éstos pueden ser asociados con la descripción de grano grueso en la densidad de probabilidad (2.167), con las definiciones

$$V(x) \equiv \frac{v_R(x) + v_L(x)}{2}, \quad (3.4)$$

para (3.1), siendo ésta la rapidez local promedio y en el caso de (3.2) con la rapidez efectiva

$$v(x) \equiv \frac{2v_R(x)v_L(x)}{v_R(x) + v_L(x)}. \quad (3.5)$$

Por último para (3.3), ésta se encuentra de manera directa en la forma deseada definiendo la tasa de cambio de dirección local promedio

$$\alpha(x) \equiv \frac{\alpha_R(x) + \alpha_L(x)}{2}. \quad (3.6)$$

Con las definiciones anteriores y suponiendo estacionariedad para la función de corriente J , podemos encontrar una relación entre dicho valor constante, a saber, J_{st} y la densidad de probabilidad estacionaria, $P_{\text{st}}(x)$

$$J_{\text{st}} = \mathcal{M}(x) \left[\mathcal{V}_{\text{drift}}(x) P_{\text{st}}(x) - \frac{d}{dx} \mathcal{D}(x) P_{\text{st}}(x) \right], \quad (3.7)$$

donde se definen el término de «drift» o corriente

$$\mathcal{V}_{\text{drift}}(x) \equiv \frac{\alpha_L(x)v_R(x) - \alpha_R(x)v_L(x)}{2\alpha(x)} + v(x) \frac{d}{dx} \frac{V(x)}{\alpha(x)}, \quad (3.8)$$

el término de *difusión efectiva* dependiente de la posición

$$\mathcal{D}(x) \equiv \frac{v_R(x)v_L(x)}{\alpha(x)}, \quad (3.9)$$

y

$$\mathcal{M}(x) \equiv \left[1 + \frac{v_L(x)v'_R(x) - v_R(x)v'_L(x)}{2V(x)\alpha(x)} \right]^{-1}. \quad (3.10)$$

En el caso de $\mathcal{V}_{\text{drift}}(x)$, (ec. 3.8), el primer término se puede asociar a la asimetría en la relación entre las tasas de cambio de dirección α 's y las rapidezces que la partícula adquiere en cada dirección; nótese que si la razón entre dichas cantidades para cada dirección fuera la misma, es decir

$$\frac{v_R(x)}{\alpha_R(x)} = \frac{v_L(x)}{\alpha_L(x)}, \quad (3.11)$$

dicho primér término sería nulo. En el caso del segundo término, éste se encuentra asociado al gradiente del cociente entre la rapidez local $V(x)$ y tasa de variación $\alpha(x)$ promedio.

Por último $\mathcal{M}(x)$ es un término adimensional que surge de la manipulación algebraica hecha.

En el caso en que la corriente es nula, i.e., $J_{\text{st}} = 0$, la expresión (3.7) se puede escribir simplemente como

$$0 = \mathcal{V}_{\text{drift}}(x) P_{\text{eq}}(x) - \frac{d}{dx} \mathcal{D}(x) P_{\text{eq}}(x), \quad (3.12)$$

cuya solución se obtiene trivialmente y está dada por

$$P_{\text{eq}}(x) = \frac{\mathcal{N}(0)}{\mathcal{D}(x)} \exp \left\{ \int^x dx' \frac{\mathcal{V}_{\text{drift}}(x')}{\mathcal{D}(x')} \right\}, \quad (3.13)$$

donde las letras en fuente caligráfica denotan que se trata de términos referidos a movimiento activo, a diferencia de aquellas utilizadas en el caso pasivo del capítulo anterior.

En este punto se ve claramente la conexión entre el caso activo y pasivo. La solución de equilibrio en una dimensión para partículas activas que exhiben patrones de movimiento «run-and-tumble» es precisamente la solución estacionaria correspondiente a una ecuación de Smoluchowski que describe partículas brownianas pasivas en un medio inhomogéneo, dada por la ecuación (2.135). A diferencia del caso pasivo ordinario, se ha conferido inhomogeneidad al medio a través de esta difusión efectiva. La palabra efectiva se utiliza en el sentido de lo expuesto en la introducción, donde estos términos reflejan fluctuaciones del sistema de procedencia no térmica características de sistemas fuera de equilibrio como lo pueden ser los sistemas activos.

La distribución (3.13) no describe un sistema en equilibrio termodinámico en el sentido de que no se puede definir a priori un coeficiente de difusión homogéneo que dé cuenta del teorema de fluctuación-disipación que dichos sistemas cumplen. En adelante también se utilizará el término distribución «no-Boltzmann-Gibbs» al referirse a una distribución del tipo (3.13), para denotar que se trata de la descripción de un sistema fuera de equilibrio termodinámico. En general, si se puede definir una difusión uniforme, D , se tiene una distribución Boltzmann-Gibbs, dada por

$$P_{\text{BG}}(x) = \frac{1}{Z} \exp \left\{ -\frac{G(x)}{D} \right\}, \quad (3.14)$$

donde

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \exp \left\{ -\frac{G(x')}{D} \right\}, \quad (3.15)$$

la cual es una especie función de partición canónica para una partícula. Como se verá en un apartado posterior, la distribución no-Boltzmann-Gibbs (3.13) se puede reducir a la expresión (3.14) en el límite difusivo, además de los casos ya mencionados en la introducción, referentes a sistemas activos libres sin interacción.

Recapitulando lo hecho hasta este momento; se partió de las ecuaciones (2.164) y (2.165), las cuales describen la particular dinámica «run-and-tumble» observada en cierto tipo de partículas *activas*, a saber, bacterias. Con dichas ecuaciones se obtuvo la expresión (2.169) para la función de corriente $J(x, t)$, expresión a partir de la cual considerando solamente el caso en que la corriente es independiente del tiempo y la posición, es decir una corriente estacionaria constante, se obtuvo una relación entre la corriente J_{st} y la densidad de probabilidad estacionaria P_{st} dada por la expresión (2.170). Posteriormente suponiendo que esta corriente en adición es nula se obtuvo finalmente la expresión (3.12) cuya solución de equilibrio (3.13) es equivalente a la solución estacionaria para partículas brownianas pasivas difundiendo en un medio con propiedades no uniformes (2.135). En resumen se partió de ecuaciones que describen cierto tipo de patrones de movimiento en partículas activas, simplificando dichas ecuaciones al considerar solamente el caso estacionario y de corriente cero.

En este punto nos remitimos a la expresión (2.134) expuesta en el capítulo anterior, deducida por Matsuo. Físicamente ésta corresponde a la descripción de la evolución probabilística de la posición de partículas brownianas pasivas difundiendo en un medio no isotérmico en el régimen sobrealmortiguado (Ec. Smoluchowski). En esta dirección, en el presente capítulo se ha encontrado una difusión efectiva en términos de las rapidezces para estos sistemas activos «run-and-tumble», por tanto dicho modelo difusivo se podría utilizar plausiblemente para describir la difusión efectiva local, característica de medios inhomogéneos.

Esta analogía entre las soluciones de equilibrio y estacionaria en el caso activo y pasivo, respectivamente nos llevan a pensar que los comportamientos difusivos en ambas se podrían corresponder surgiendo con ello algunas de las preguntas a responder en el presente trabajo:

- ¿Podríamos distinguir con base en el comportamiento difusivo si se trata de uno u otro caso para el caso estacionario?
- ¿Se puede tratar una partícula activa «run-and-tumble» utilizando simplemente la teoría empleada para el caso pasivo en un medio inhomogéneo?

3.2. Análisis

Para responder a las preguntas planteadas anteriormente se aplicarán ambos enfoques a partículas (pasivas y activas) que se mueven unidimensionalmente dentro de potenciales de energía característicos, a saber potenciales lineal, armónico y de doble pozo. En ambos casos se obtienen distribuciones de probabilidad las cuales serán contrastadas.

1) **Movimiento activo: Partícula activa que exhibe patrones de movimiento «run-and-tumble»**

Se utiliza un enfoque del tipo Einstein-Smoluchowski tomando en extenso la teoría de patrones dinámicos «run-and-tumble» para obtener una solución estacionaria en términos de la densidad de probabilidad, considerando una corriente nula. La solución (distribución de probabilidad) a partir de estas consideraciones se desarrollará para cada potencial confinante de la partícula.

2) **Movimiento browniano pasivo: Partícula browniana ordinaria en contacto con un baño caracterizado por una temperatura efectiva inhomogénea.**

Se emplea un enfoque Ornstein-Uhlenbeck a través de la de la ecuación de Langevin para el caso sobreamortiguado correspondiente a la ecuación de Smoluchowski (2.128) referida al caso de un baño térmico inhomogéneo. En dicha ecuación estocástica se introduce la difusión dependiente del espacio (3.9), en términos de cantidades que dan cuenta de las propiedades de autopropulsión y persistencia inherentes al movimiento activo. La ecuación de Langevin se resuelve numéricamente obteniendo posteriormente la densidad de probabilidad correspondiente a los procesos de desplazamiento obtenidos en dicha ecuación.

3) **Comparación de los comportamientos difusivos a través de las densidades de probabilidad obtenidos en cada caso.**

En los siguientes apartados se trata con mayor detenimiento el tratamiento particular expuesto en 1) y 2) para los casos activo y pasivo.

3.3. Caso activo: «run-and-tumble»

En lo que concierne a movimiento activo se obtienen teóricamente distribuciones de probabilidad estacionarias con corriente nula. Para ello se extiende la teoría expuesta en la sección 2.3.

Se parte de la solución obtenida a partir de las ecuaciones (2.164) y (2.165) que describen el tipo de patrones dinámicos en cuestión. Retomando la solución de equilibrio (2.172)

$$P_{\text{eq}}(x) = P(x_0) \left[\frac{v_R(x_0) v_L(x_0)}{v_R(x) v_L(x)} \right] \left[\frac{v_R(x) + v_L(x)}{v_R(x_0) + v_L(x_0)} \right] \exp \left[\int_{x_0}^x \frac{\alpha_L(x') v_R(x') - \alpha_R(x') v_L(x')}{2v_R(x') v_L(x')} dx' \right], \quad (3.16)$$

a continuación se establece el modelo que seguirán las rapideces adquiridas por la partícula en ambas direcciones $v_{R,L}(x)$ así como la tasa de cambio en la dirección $\alpha_{R,L}(x)$. Dicho modelo describe sistemas confinados por lo cual se estudiarán este tipo de distribuciones probabilísticas para para la posición de partículas activas atrapadas en potenciales lineal, armónico y de doble pozo.

3.3.1. Modelo de confinamiento quimiotáctico

Se supondrá que las tasas de cambio de dirección «tumbling», $\alpha_{R,L}(x)$ son idénticas en ambas direcciones e independientes de la posición, por tanto

$$\alpha_R \equiv \alpha_L \equiv \alpha, \quad (3.17)$$

lo cual indica que no existe una preferencia de cambio en la dirección, siendo a priori equiprobables e iguales los cambios de dirección aleatorios hacia la derecha e izquierda. Como se mencionó anteriormente, la dependencia espacial podría dar cuenta de movimiento quimiotáctico, el cual es descartado en este análisis.

En lo referente al modelo para las rapideces derecha e izquierda, éstas constan de dos componentes: la primera se refiere a la autopropulsión constante, v_0 , que mantendría la partícula libremente; la segunda toma en cuenta que dichas rapideces son influidas por una fuerza externa $f(x)$ que se acopla al movimiento a través de una movilidad constante μ . A la derecha dicha fuerza contribuye al movimiento mientras que con dirección izquierda se opone al mismo. Por tanto se tiene

$$v_R(x) = v_0 + \mu f(x), \quad (3.18)$$

$$v_L(x) = v_0 - \mu f(x). \quad (3.19)$$

La fuerza externa se considera conservativa, por tanto derivable del potencial $U(x)$, es decir

$$f(x) = -\frac{dU(x)}{dx}, \quad (3.20)$$

Así, las rapideces se expresan finalmente como

$$v_R(x) = v_0 - \mu \frac{dU(x)}{dx}, \quad (3.21)$$

$$v_L(x) = v_0 + \mu \frac{dU(x)}{dx}. \quad (3.22)$$

El modelo anterior se ha utilizado ampliamente como punto de partida para describir el movimiento de partículas activas confinadas [13, 24].

3.3.2. Potencial efectivo y fuerza termoforética

La distribución de probabilidad no-Boltzmann-Gibbs obtenida a partir de las ecuaciones «run-and-tumble» (ecuación 3.13), que representa tanto sistemas activos como pasivos en contacto con un medio inhomogéneo (estacionarios, $J_{st=0}$), se puede interpretar en términos de la aparición de una fuerza termoforética. Definiendo la función

$$\Phi(x) = \ln \mathcal{D}(x) - \int_0^x dx' \frac{\mathcal{V}_{\text{drift}}(x')}{\mathcal{D}(x')}, \quad (3.23)$$

la distribución (3.13) se puede escribir como

$$P_{\text{n-BG}}(x) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \exp[-\Phi(x)]. \quad (3.24)$$

En este punto se introduce la identificación

$$\mathcal{D}(x) = \mu k_B \mathcal{T}(x), \quad (3.25)$$

la cual se considera una suerte de relación de fluctuación-disipación, esto en el sentido de que de manera rigurosa la movilidad debería ser también dependiente de la posición. La plausibilidad de esto se discute en la sección 3.7. Además, con base al modelo propuesto anteriormente para las tasas de «tumbling» $\alpha_{R,L}(x)$ y las rapideces $v_{R,L}(x)$, la expresión (3.8) para $\mathcal{V}_{\text{drift}}(x)$ es

$$\mathcal{V}_{\text{drift}}(x) = -\mu U'(x), \quad (3.26)$$

siendo la expresión usual para un término de corriente. Utilizando la identificación (3.25) y la expresión para el término de corriente (3.26) en (3.23), la distribución no-Boltzmann-Gibbs se puede escribir finalmente como

$$P_{\text{n-BG}}(x) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \exp \left\{ - \int_0^x dx' \frac{U'_{\text{eff}}(x')}{k_B \mathcal{T}(x')} \right\}, \quad (3.27)$$

con la normalización identificada en términos de la una suerte de función de partición para el sistema, dada por

$$\mathcal{Z} = \int dx \exp \left\{ - \int_0^x dx' \frac{U'_{\text{eff}}(x')}{k_B \mathcal{T}(x')} \right\}, \quad (3.28)$$

donde se ha definido el potencial efectivo

$$U_{\text{eff}}(x) = U(x) + k_B \mathcal{T}(x). \quad (3.29)$$

Como se puede ver en la expresión anterior, este potencial efectivo define dos fuerzas en el sistema, una debida al confinamiento dado por el potencial externo $U(x)$ y otra de naturaleza termoforética que surge por la inhomogeneidad presente en la temperatura efectiva $\mathcal{T}(x)$. La fuerza termoforética está dada por

$$f_{tf} = -k_B \mathcal{T}'(x). \quad (3.30)$$

Esta fuerza termoforética provee una interpretación a las distribuciones de probabilidad para movimiento browniano pasivo en un medio efectivo inhomogéneo a tratar en secciones posteriores.

3.3.3. Difusión y temperatura efectiva

En términos del modelo aquimiotáctico para partículas confinadas bajo la acción del potencial $U(x)$, la difusión efectiva (3.9) está dada por

$$\mathcal{D}(x) = \frac{v_0^2}{\alpha} \left\{ 1 - \frac{\mu^2}{v_0^2} \left[\frac{dU(x)}{dx} \right]^2 \right\}. \quad (3.31)$$

Como se mencionó anteriormente, vía la identificación (3.25), se puede asociar una temperatura efectiva, expresada mediante

$$\mathcal{T}(x) = T_0 \left\{ 1 - \frac{\mu^2}{v_0^2} \left[\frac{dU(x)}{dx} \right]^2 \right\}, \quad (3.32)$$

donde

$$T_0 = \frac{v_0^2}{\alpha \mu k_B}. \quad (3.33)$$

Con lo anterior, la fuerza termoforética (3.30) se escribe explícitamente como

$$f_{tf} = \frac{2\mu^2}{v_0^2} k_B T_0 U'(x) U''(x) \quad (3.34)$$

Las expresiones (3.31) y (3.32), centrales para el presente trabajo, merecen algunos comentarios.

En ambos casos estos términos efectivos no representan las fluctuaciones térmicas del sistema, por tanto claramente no describen movimiento browniano ordinario. En el contexto de movimiento activo una interpretación posible se refiere a que éstos dan cuenta de las fluctuaciones internas de la partícula debidas a los procesos internos microscópicos que la mantienen fuera de equilibrio.

Del mismo modo en ambas expresiones aparece un signo negativo, lo cual contrasta con expresiones análogas para sistemas brownianos pasivos fuera de equilibrio [45]. Considerando que este es otro tipo de sistema difusivo, la física detrás de esto se puede explicar a través de la expresión para la temperatura efectiva (3.32). Utilizando terminología afín se podría hablar en términos de regiones «calientes» para el caso en que la temperatura efectiva es máxima, i.e., cuando no existe confinamiento, y regiones «frías» donde el confinamiento disminuye la magnitud de la temperatura efectiva. En este sentido si se piensa en una partícula activa ubicada en la región donde el potencial es mínimo, ésta se encuentra en un punto caliente donde por supuesto su movimiento difusivo es mayor. Conforme comienza a explorar la región de confinamiento y se acerca a zonas donde el potencial externo es mayor, v.g. una pared impenetrable, ésta ve disminuida su movimiento difusivo, siendo estas zonas asociadas a temperaturas efectivas más «frías». Por lo anterior, será más probable encontrar a dicha partícula en las regiones más frías de la región de confinamiento, lo cual refleja numerosos resultados experimentales referentes a partículas activas confinadas donde éstas tienden a acumularse en las fronteras del sistema [46, 47, 48], reflejándose en las distribuciones de probabilidad no gaussianas para encontrar a la partícula en cierto punto de la región de confinamiento [49, 24].

3.4. Caso pasivo: ecuación de Langevin

3.4.1. Tratamiento matemático

Retomemos la ecuación de Smoluchowski para una partícula browniana pasiva moviéndose en un medio caracterizado por una temperatura inhomogénea (ec. 2.130)

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[-\mu U'(x) P(x, t) - \mu \frac{\partial}{\partial x} T(x) P(x, t) \right]. \quad (3.35)$$

Como se vio en la sección 3.1, el mapeo que se puede establecer entre los casos activo y pasivo debido a la estructura similar de sus distribuciones de probabilidad estacionarias nos lleva a plantear la posibilidad de utilizar el término efectivo (difusión o temperatura) como el «modelo» difusivo para el movimiento browniano pasivo en un medio inhomogéneo, es decir,

$$D(x) \rightarrow \mathcal{D}(x), \quad (3.36)$$

$$T(x) \rightarrow \mathcal{T}(x). \quad (3.37)$$

La ecuación de Langevin en el régimen sobreamortiguado equivalente también se puede obtener rigurosamente en el nivel de una sola realización [35]. Así la ecuación diferencial estocástica que describirá el movimiento browniano pasivo en este medio inhomogéneo se expresa como

$$\frac{dx(t)}{dt} = -\mu U'(x) + \sqrt{\mathcal{T}(x)} \boldsymbol{\xi}_x(t), \quad (3.38)$$

con las propiedades del ruido blanco gaussiano

$$\langle \boldsymbol{\xi}_x(t) \rangle = 0, \quad (3.39)$$

$$\langle \xi_x(t) \xi_x(t') \rangle = \frac{2}{\mu k_B} \delta(t - t'), \quad (3.40)$$

donde se ha supuesto del mismo modo que en el caso activo, la identificación

$$\mathcal{D}(x) = \frac{k_B \mathcal{T}(x)}{\gamma} = \mu k_B \mathcal{T}(x). \quad (3.41)$$

La ecuación en términos de la difusión efectiva se puede escribir como

$$\frac{dx(t)}{dt} = -\mu U'(x) + \sqrt{2\mathcal{D}(x)} \xi(t), \quad (3.42)$$

con las propiedades del ruido

$$\langle \xi_x(t) \rangle = 0, \quad (3.43)$$

$$\langle \xi_x(t) \xi_x(t') \rangle = \delta(t - t'). \quad (3.44)$$

Por supuesto, para contrastar con el caso activo se requieren las distribuciones de probabilidad correspondientes, las cuales surgen al considerar el ensamble del conjunto de realizaciones del sistema. La solución a esta ecuación se puede aproximar mediante la expansión en Taylor de una variable. En este caso se utilizó la aproximación de orden más bajo (esquema de Euler) [50]. Con ello se obtiene

$$\Delta \mathbf{x} = -\mu U'(x) \Delta t + \sqrt{2\mathcal{D}(x)} \Delta t \Psi, \quad (3.45)$$

donde Ψ se refiere al ruido en esta aproximación. Esta ecuación se resolvió utilizando el algoritmo de Euler explícito expresado de forma general como

$$x(t) \approx x(t_0) + a(x(t_0))(t - t_0) + b(x(t_0)) [W(t) - W(t_0)]. \quad (3.46)$$

Para el código de solución de (3.45) referirse al apéndice.

3.4.2. Interpretación

Este sistema físico se interpretará con base al potencial efectivo (3.29), el cual describe los efectos competitivos de una fuerza termoforética (3.30) que repele a las partículas pasivas fuera de las zonas más «calientes» y la de atrapamiento debida al potencial externo que confina a las mismas. Como se verá más adelante en el análisis para los sistemas pasivos, la acumulación de las partículas en determinadas zonas se puede ver desde el punto de vista de la aparición de ciertos puntos estables en el potencial efectivo que diferencian comportamientos del tipo persistente no-gaussianos y aquellos de poca persistencia gaussianos.

3.5. Aplicación a potenciales característicos

El estudio por cada potencial se divide en la parte correspondiente a una partícula activa que exhibe dinámica «run-and-tumble» bajo la influencia de cierto potencial externo y aquella para una partícula browniana pasiva desplazándose en un medio efectivo inhomogéneo, sometida al mismo potencial. Posteriormente se contrastan los comportamientos difusivos a través de la densidad de probabilidad estacionaria obtenida en cada caso.

3.5.1. Potencial lineal

Este es el caso más simple de confinamiento, sin embargo se trata del más intuitivo. Físicamente se puede corresponder con una partícula activa, e.g., una bacteria que se desplaza hacia arriba sobre una pared, estando bajo la influencia del campo gravitacional (figura 3.1).

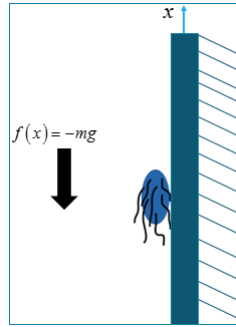


Figura 3.1: E. coli desplazándose ante la influencia del campo gravitacional.

En este caso el potencial está dado por

$$U(x) = mgx, \quad (3.47)$$

siendo m la masa de la partícula. Alrededor de este sistema se han hecho varios estudios, abarcando desde la solución para partículas «run-and-tumble» en una dimensión [44] [24] y dimensiones mayores [13], hasta la situación experimental en tres dimensiones [7]. Debido a este estudio exhaustivo aquí sólo se expondrá brevemente el caso estacionario de movimiento con el fin de ejemplificar el tratamiento con algunas de las expresiones desarrolladas en la sección 3.3.

El término $\mathcal{V}_{\text{drift}}(x)$ se corresponde con la velocidad de sedimentación de la partícula

$$\mathcal{V}_{\text{drift}}(x) = v_{\text{sed}} = -\mu mg. \quad (3.48)$$

Por otro lado, en este caso la difusión efectiva (ec. 3.9) es constante y está dada por

$$\mathcal{D} = \frac{v_0^2}{\alpha} \left[1 - \frac{\mu^2 m^2 g^2}{v_0^2} \right] = \frac{v_0^2}{\alpha} \left[1 - \frac{v_{sed}^2}{v_0^2} \right]. \quad (3.49)$$

Para este sistema es simple emplear el potencial en la solución de equilibrio (3.13), obteniéndose

$$P_{eq}(x) = \frac{\mathcal{N}(0)}{1 - \frac{\mu^2 m^2 g^2}{v^2}} \exp \left\{ - \int_0^x dx' \frac{\mu m g}{\frac{v^2}{\alpha} \left[1 - \frac{\mu^2 m^2 g^2}{v^2} \right]} \right\}, \quad (3.50)$$

cuyo término exponencial se integra trivialmente

$$P_{eq}(x) = \frac{\mathcal{N}(0)}{1 - \frac{\mu^2 m^2 g^2}{v^2}} \exp \left\{ - \frac{\mu m g}{\frac{v^2}{\alpha} \left[1 - \frac{\mu^2 m^2 g^2}{v^2} \right]} x \right\}. \quad (3.51)$$

Por supuesto esta distribución de probabilidad debe normalizarse

$$\int_0^\infty dx P_{eq}(x) = 1, \quad (3.52)$$

$$\mathcal{N}(0) = m g \mu \frac{\alpha}{v^2}. \quad (3.53)$$

Por tanto la densidad de probabilidad normalizada es

$$P_{eq}(x) = \frac{m g}{\frac{v^2}{\mu \alpha} \left(1 - \frac{\mu^2 m^2 g^2}{v^2} \right)} \exp \left\{ - \frac{m g}{\frac{v^2}{\mu \alpha} \left[1 - \frac{\mu^2 m^2 g^2}{v^2} \right]} x \right\}. \quad (3.54)$$

Ésta puede reescribirse utilizando la expresión para la temperatura efectiva (ec. 3.32) como

$$P_{eq}(x) = \frac{m g}{k_B T_0 \left(1 - \frac{v_{sed}^2}{v_0^2} \right)} \exp \left[- \frac{m g}{k_B T_0 \left(1 - \frac{v_{sed}^2}{v_0^2} \right)} x \right]. \quad (3.55)$$

Análisis

En este caso la difusión efectiva es constante y por tanto lo es la cantidad que hemos denominado como temperatura efectiva. Dicha temperatura homogénea se puede asociar con la interpretación equivalente en la que la partícula activa se comportaría como una pasiva difundiendo en un medio con temperatura homogénea

$$\mathcal{T} = T_0 \left\{ 1 - \frac{v_{sed}^2}{v_0^2} \right\}, \quad (3.56)$$

para el caso en que $v_{sed} < v_0$. Ahora bien, esta partícula activa puede desplazarse a una velocidad mayor a aquella a la que se sedimenta dada la autopropulsión en su movimiento. El caso límite en que la autopropulsión supera por mucho a la sedimentación, i.e., para $v_{sed}/v_0 \ll 1$, la temperatura del baño está dada por el valor máximo, a saber, $\mathcal{T} = T_0$, estableciéndose un perfil de distribución que decae exponencialmente a lo largo de la pared. Por el contrario, si ambas velocidades tienden a ser iguales, i.e., $v_{sed} \approx v_0$, las partículas tienden a acumularse a lo largo de la pared como lo muestra la distribución, en la que en dicho límite el término exponencial sería igual a la unidad siendo así constante la distribución de las partículas a lo largo de la pared.

3.5.2. Potencial armónico

En este potencial y el siguiente se desarrolla extensivamente el tratamiento para el caso activo y pasivo, contrastándose y analizándose posteriormente.

El potencial viene dado por

$$U(x) = \frac{1}{2} k x^2, \quad (3.57)$$

donde k es la «constante de resorte» ordinaria, en este caso relacionada con la magnitud de la barrera de energía. La derivada de dicho potencial es

$$U'(x) = kx. \quad (3.58)$$

Caso activo: «run-and-tumble»

Sustituyendo en la expresión (3.13) se tiene

$$P_{eq}(x) = \frac{\mathcal{N}(0)}{1 - \frac{\mu^2}{v_0^2} k^2 x^2} \exp \left[-\frac{\alpha}{v_0^2} \int_0^x dx' \frac{\mu k x'}{\left(1 - \frac{\mu^2}{v_0^2} k^2 x'^2\right)} \right], \quad (3.59)$$

cuya integral se puede resolver trivialmente con el cambio de variable $u = 1 - \frac{\mu^2}{v_0^2}k^2x^2$, así, $du = -2\frac{\mu^2}{v_0^2}k^2xdx$; entonces sólo resta multiplicar y dividir por $2\mu k$. Con lo anterior la expresión queda como

$$P_{\text{eq}}(x) = \frac{\mathcal{N}(0)}{1 - \frac{\mu^2}{v_0^2}k^2x^2} \exp \left[\frac{\alpha}{2\mu k} \int_0^u \frac{du}{u} \right]. \quad (3.60)$$

Entonces

$$P_{\text{eq}}(x) = \frac{\mathcal{N}(0)}{1 - \frac{\mu^2}{v_0^2}k^2x^2} \exp \left[\frac{\alpha}{2\mu k} \ln \left(1 - \frac{\mu^2}{v_0^2}k^2x^2 \right) \right], \quad (3.61)$$

ó lo que es lo mismo

$$P_{\text{eq}}(x) = \mathcal{N}(0) \left(1 - \frac{\mu^2}{v_0^2}k^2x^2 \right)^{\frac{\alpha}{2\mu k} - 1}. \quad (3.62)$$

En un sentido estrictamente matemático, la densidad de probabilidad debe ser positiva para lo cual debe satisfacerse

$$1 - \frac{\mu^2}{v_0^2}k^2x^2 \geq 0. \quad (3.63)$$

De la desigualdad anterior se llega a que el intervalo de definición para la densidad de probabilidad es

$$|x| = \frac{v}{\mu k} \quad \text{ó} \quad -\frac{v}{\mu k} \leq x \leq \frac{v}{\mu k}. \quad (3.64)$$

En un sentido físico también se puede argumentar que la partícula no puede moverse más allá de lo que le permite la fuerza autopropulsiva $\mu^{-1}v_0$ al igualarse con la fuerza de atrapamiento dada por $-U'(x)$, obteniéndose con ello la región de movimiento $x \in [-x_m, x_m]$. Lo anterior se expresa matemáticamente como

$$|U'(x_m)| = \frac{v_0}{\mu}, \quad (3.65)$$

siendo para este potencial

$$kx_m = \frac{v_0}{\mu}, \quad (3.66)$$

es decir

$$x_m = \frac{v_0}{\mu k}. \quad (3.67)$$

En adición, esta longitud que caracteriza al movimiento se puede utilizar para adimensionalizar y con ello escalar la región de movimiento en términos

de la variable $\bar{x} = \frac{x}{x_m}$ siendo ésta ahora $\bar{x} \in [-1, 1]$. Con esta nueva variable la densidad de probabilidad (3.62) se reescribe como

$$P_{\text{eq}}(x) = \mathcal{N}(0) (1 - \bar{x}^2)^{\frac{\alpha}{2\mu k} - 1}. \quad (3.68)$$

Naturalmente la expresión anterior requiere en adición ser normalizada en el intervalo de definición prescrito

$$\mathcal{N}(0) \frac{v_0}{\mu k} \int_{-1}^1 d\bar{x} (1 - \bar{x}^2)^{\frac{\alpha}{2\mu k} - 1} = 1, \quad (3.69)$$

de donde la solución de la integral definida es

$$\int_{-1}^1 d\bar{x} (1 - \bar{x}^2)^{\frac{\alpha}{2\mu k} - 1} = \frac{\sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{\alpha}{2\mu k}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{\alpha}{2\mu k}\right)}. \quad (3.70)$$

Con lo anterior, se tiene que la expresión para la densidad de probabilidad (adimensional) en el caso de una partícula activa moviéndose en un potencial armónico está dada por

$$P_{\text{eq}}(x) = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{\alpha}{2\mu k}\right)}{x_m \sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{\alpha}{2\mu k}\right)} (1 - \bar{x}^2)^{\frac{\alpha}{2\mu k} - 1}. \quad (3.71)$$

Esta densidad de probabilidad está caracterizada por el parámetro

$$\beta = \frac{\alpha}{2\mu k}. \quad (3.72)$$

Veamos ahora el significado de éste.

La tasa de cambio en la dirección α se encuentra relacionada a la longitud de persistencia a través de

$$l_p \equiv \frac{v_0}{\alpha}. \quad (3.73)$$

Un valor grande de α significa un cambio constante en la dirección lo cual implica que se mantiene por poco tiempo la dirección; por el contrario, un valor pequeño de α implica que la partícula mantiene por más tiempo su dirección siendo mayor su longitud de persistencia. Lo anterior es evidente de la definición (3.73). Así, la interpretación de β se vuelve más clara en términos de una relación de longitudes lo cual se obtiene al multiplicar y dividir (3.72) por la velocidad de autopropulsión v_0 .

$$\beta^* = \frac{\alpha v_0}{2v_0 \mu k}. \quad (3.74)$$

Ahora, recordemos que $x_m = v_0/\mu k$ es una longitud característica del sistema (ver figura 3.2), por tanto la expresión anterior en última instancia nos relaciona dos longitudes

$$\beta^* = \frac{\text{longitud característica}}{2 \times \text{longitud de persistencia}}. \quad (3.75)$$

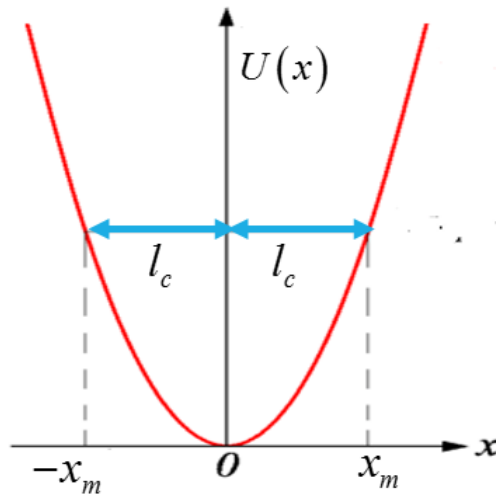


Figura 3.2: Potencial armónico visto desde un punto de vista cualitativo. Se indican los puntos de confinamiento y la longitud característica del sistema.

Si bien β es el parámetro que se varía para este análisis, la comprensión de los comportamientos se hacen con base en la interpretación en términos de las longitudes del sistema. Dicho lo anterior ahora se expone y analiza el comportamiento difusivo a través de las densidades de probabilidad de «equilibrio» para distintos valores de β .

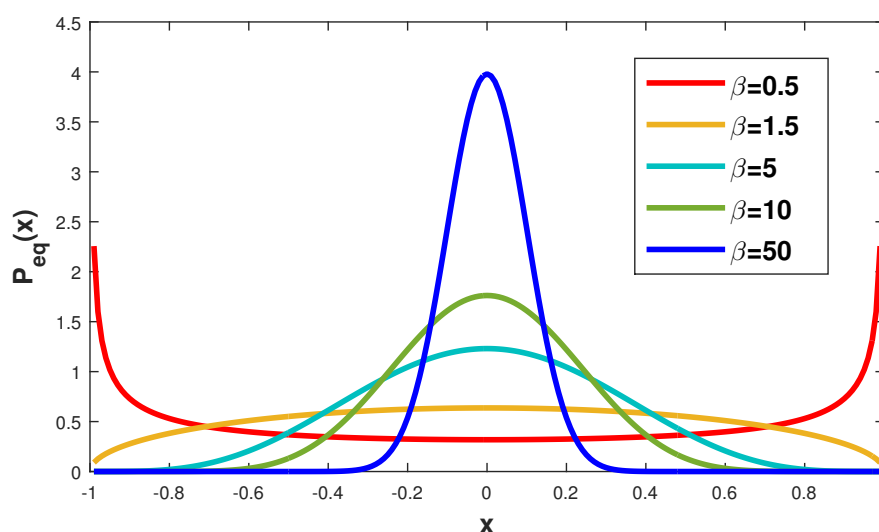


Figura 3.3: Densidades de probabilidad de «equilibrio» para distintos valores del parámetro β .

En la figura 3.3 se muestran las distribuciones de probabilidad para la posición de las partículas. En ésta se puede apreciar que conforme se aumenta el valor de β , es más probable encontrar a las partículas cerca de la región central, mientras que para β más pequeños, éstas «prefieren» la zona cercana a las fronteras en 1 y -1, siendo más probable encontrarlas ahí. ¿Cómo se explica este comportamiento?

Un valor pequeño de β indica que la longitud característica del sistema y la longitud de persistencia son aproximadamente iguales. Por tanto la partícula tiene un movimiento manifiestamente persistente característico del movimiento activo. Esto tiene como consecuencia una distribución bastante alejada de una gaussiana más característica de sistemas pasivos en equilibrio termodinámico o cercanos a éste.

Por el contrario, un valor grande de β está relacionado a una marcada diferencia entre la longitud característica y la longitud de persistencia. Por ejemplo, en el caso de $\beta = 50$ la longitud de persistencia es una centésima parte de la longitud característica. Un movimiento de este tipo es más cercano a aquél de una partícula browniana pasiva ordinaria poco persistente, por lo cual estas distribuciones son más cercanas a una distribución gaussiana, concentrándose la probabilidad de encontrar a las partículas en la región central del potencial.

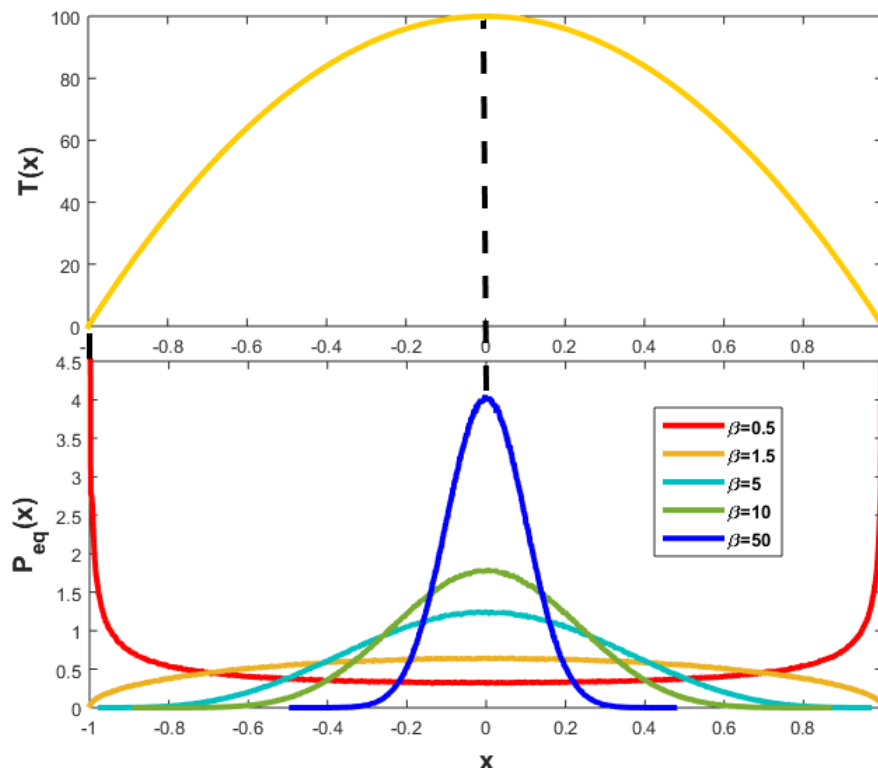


Figura 3.4: Distribuciones de probabilidad en función del parámetro β contrastadas con el perfil de temperatura efectiva.

Los resultados anteriores descritos por el parámetro β se pueden explicar, como se adelantó en la sección 3.3, en términos del perfil de temperatura efectiva. En la figura 3.4 se contrastan ambos comportamientos. En el caso de movimientos persistentes (β pequeña) se observan las distribuciones no-Boltzmann-Gibbs características del movimiento activo, donde la acumulación de partículas en las fronteras del confinamiento coincide con una temperatura efectiva «cero». Esto se debe a que en este tipo de movimiento la exploración espacial es más grande por lo que las partículas llegan con mayor facilidad a las zonas donde la presencia del potencial confinante es mayor; por tanto la partícula activa ve disminuido su movimiento difusivo, lo cual está relacionado con regiones «frías» del perfil de temperatura efectiva. Así, probabilísticamente hablando, las partículas tienden a pasar más tiempo en regiones donde su movimiento se ve ralentizado. Por el contrario, cuando β es grande, i.e, partículas con persistencia pequeña más parecidas al comportamiento browniano pasivo ordinario, éstas tienden a acumularse en los mínimos del potencial debido a la poca exploración espacial, coinci-

diendo con temperaturas efectivas grandes que dan cuenta de un movimiento difusivo que no percibe el confinamiento de manera marcada.

Caso pasivo: difusión y potencial efectivo

Este sistema consiste en partículas brownianas pasivas difundiendo en un medio inhomogéneo, descrito mediante la difusión/temperatura efectiva, bajo la influencia de un potencial efectivo dado por la expresión (3.29).

La difusión efectiva para este sistema está dada por

$$\mathcal{D}(x) = \frac{v_0^2}{\alpha} \left(1 - \frac{\mu^2}{v_0^2} k^2 x^2 \right), \quad (3.76)$$

la cual se utiliza en la ecuación (3.45), obteniéndose

$$\Delta x = -\mu k x \Delta t + \sqrt{\frac{2v_0^2}{\alpha} \left(1 - \frac{\mu^2}{v_0^2} k^2 x^2 \right)} \Delta t \Psi. \quad (3.77)$$

Al igual que en el caso de las distribuciones de probabilidad «run-and-tumble» obtenidas para el caso activo, también esta expresión se adimensionaliza. En el caso de la posición se utiliza la misma longitud característica x_m que define la región de confinamiento

$$\bar{x} = \frac{x}{x_m} = \frac{\mu k}{v} x. \quad (3.78)$$

El tiempo se adimensionaliza con el tiempo característico $\tau = 1/\mu k$

$$\bar{t} = \mu k t. \quad (3.79)$$

Con estas identificaciones, la expresión adimensionalizada a resolver es

$$\Delta \bar{x} = -\bar{x} \Delta \bar{t} + \sqrt{\frac{2\mu k}{\alpha} (1 - \bar{x}^2)} \Delta \bar{t} \Psi. \quad (3.80)$$

Nuevamente en este caso aparece el parámetro adimensional β . Como se mencionó previamente se obtienen las distribuciones de probabilidad al considerar el ensamble del conjunto de realizaciones para este proceso. Las distribuciones de probabilidad obtenidas se muestran en la figura 3.5.

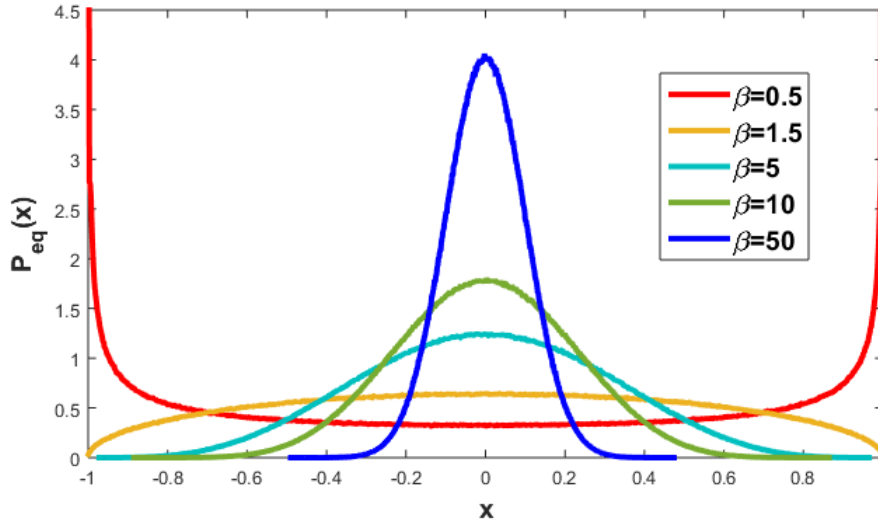


Figura 3.5: Distribuciones de probabilidad para partículas Brownianas pasivas difundándose en un medio inhomogéneo no isotérmico.

El análisis se hace con referencia a la fuerza y potencial efectivos del sistema, sus puntos de estabilidad y la competencia entre el efecto termoforético opuesto al de atrapamiento. La fuerza termoforética (3.30) para el potencial armónico es

$$f_{tf}(x) = 2 \frac{k^2 \mu}{\alpha} x. \quad (3.81)$$

Esta fuerza se opone a la de atrapamiento expeliendo a las partículas de las zonas con mayor temperatura efectiva hacia las fronteras del sistema más «frías» (movimiento persistente). El efecto de ambas fuerzas se expresa a través de la fuerza efectiva que percibe el sistema

$$f_{eff}(x) = -k \left(1 - \frac{2\mu k}{\alpha} \right) x, \quad (3.82)$$

en la cual surge el parámetro β . A esta fuerza se puede asociar el potencial efectivo

$$U_{eff}(x) = \frac{1}{2} k x^2 \left(1 - \frac{1}{\beta} \right) + k_B T_0. \quad (3.83)$$

Este potencial por supuesto también se encuentra en términos de β por lo cual es este parámetro el que define los tres tipos de comportamiento observados en la figura 3.5. A partir de la expresión (3.83) se puede inferir que el valor crítico $\beta_{crit} = 1$ da cuenta de los distintos comportamientos de la siguiente manera:

- i) ($\beta > 1$) El potencial efectivo corresponde al caso de una parábola que abre hacia arriba con un punto estable en el centro de la región de confinamiento, por lo cual describe el comportamiento observado en el movimiento de baja persistencia gaussiano.
- ii) ($\beta = 1$) El potencial efectivo es constante con lo que el punto de equilibrio estable se degenera abarcando toda la región de confinamiento $[-x_m, x_m]$.
- iii) ($\beta < 1$) El potencial efectivo corresponde a una parábola que abre hacia abajo colapsando así las posiciones de equilibrio estable en los dos puntos de confinamiento en las fronteras, $\pm x_m$.

Con esta visión más profunda del parámetro β , se explica el efecto de competencia termoforético y de atrapamiento, que describe cambios en la estabilidad del sistema generando con ello los distintos comportamientos que adquiere la partícula browniana pasiva en este potencial efectivo.

Caso activo vs caso pasivo

Como se pudo ver en los análisis anteriores los comportamientos difusivos en ambos casos se corresponden exactamente. Lo anterior queda de manifiesto en la figura 3.6 en la cual se encuentran superpuestas las distribuciones de probabilidad para ambos casos.

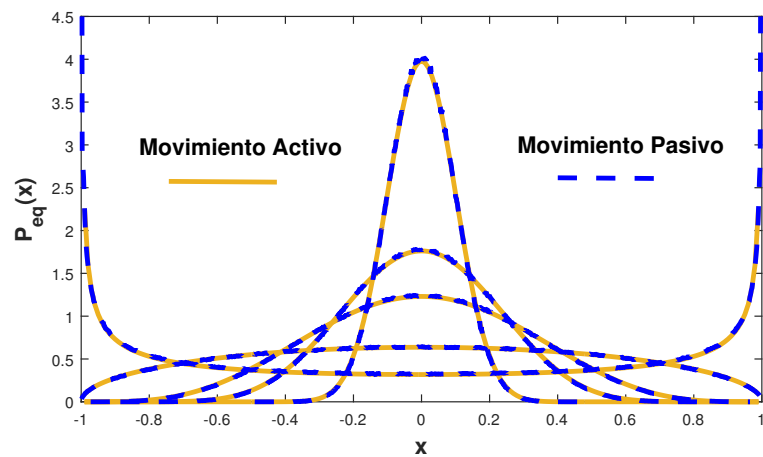


Figura 3.6: Comparación de las distribuciones de probabilidad obtenidas para partículas activas que exhiben patrones de movimiento «run-and-tumble» y aquellas para partículas pasivas moviéndose en un medio efectivo inhomogéneo.

Con esto se puede concluir que el comportamiento difusivo es indistinguible (en el límite estacionario) cuando se contrastan las distribuciones de probabilidad de partículas activas «run-and-tumble» difundiéndose en una dimensión suponiendo $J_{st} = 0$ y aquellas que resultan del movimiento de partículas pasivas en un medio efectivo inhomogéneo.

3.5.3. Potencial de doble pozo

El potencial en este caso se expresa como

$$U(x) = \Delta E \left(\frac{x^4}{L^4} - 2\frac{x^2}{L^2} \right), \quad (3.84)$$

donde ΔE se refiere a la altura de la barrera de energía y L a la mitad de la distancia entre los puntos mínimos del potencial (ver figura 3.7). La derivada de este potencial es

$$U'(x) = \frac{4\Delta E}{L} \frac{x}{L} \left(\frac{x^2}{L^2} - 1 \right) \quad (3.85)$$

Caso activo: «run-and-tumble»

Utilizando la derivada del potencial en (??) se obtiene la distribución de probabilidad de equilibrio

$$P_{\text{eq}}(x) = \frac{\mathcal{N}(0)}{1 - \frac{16\Delta E^2 \mu^2}{v_0^2 L^2} \frac{x^2}{L^2} \left(\frac{x^2}{L^2} - 1 \right)^2} \exp \left\{ -\frac{\alpha}{v_0^2} \int_0^x dx' \frac{\frac{4\mu\Delta E}{L} \frac{x'}{L} \left(\frac{x'^2}{L^2} - 1 \right)}{\left[1 - \frac{16\Delta E^2 \mu^2}{v_0^2 L^2} \frac{x'^2}{L^2} \left(\frac{x'^2}{L^2} - 1 \right)^2 \right]} \right\}, \quad (3.86)$$

Para que ésta última sea positiva definida se requiere

$$1 - \frac{16\Delta E^2 \mu^2}{v_0^2 L^2} \frac{x^2}{L^2} \left(\frac{x^2}{L^2} - 1 \right)^2 \geq 0. \quad (3.87)$$

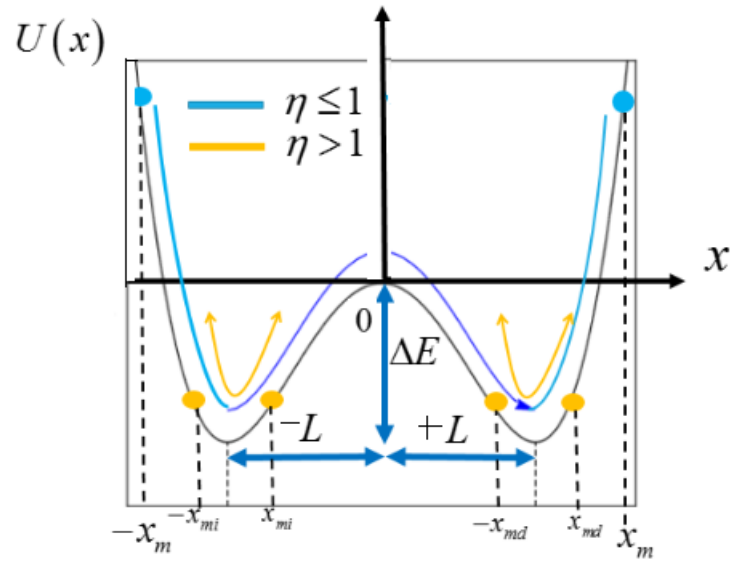


Figura 3.7: Potencial de doble pozo ilustrando cualitativamente las cantidades involucradas en su descripción. Para $\eta \leq 1$ se muestra el desplazamiento libre entre ambos pozos de potencial. Cuando $\eta > 1$ la partícula el movimiento de la partícula se encuentra confinado a las regiones correspondientes a los pozos no pudiendo sobrepasar la barrera de energía ΔE .

Si observamos con más detalle la condición (3.87) estrictamente matemática, ésta se corresponde físicamente con que la fuerza autopropulsiva de la partícula supere a la de atrapamiento que confiere el potencial

$$|f_{\text{atrapamiento}}| < |f_{\text{autopropulsiva}}|. \quad (3.88)$$

En breve se volverá a esta condición, por el momento primero es conveniente encontrar los puntos x_m donde la fuerza de atrapamiento iguala a la autopropulsiva, determinando con ello la región de difusión de las partículas $\bar{x} \in [-x_m, x_m]$ cuando se trata con potenciales simétricos, lo cual es el caso del potencial armónico y de doble pozo (figura 3.7). Más allá de éstos las partículas no pueden nadar dado que el atrapamiento supera su capacidad de autopropulsión. Para encontrar dichos puntos se requiere resolver la ecuación correspondiente a la equivalencia entre la fuerza de atrapamiento y la autopropulsiva

$$|-U'(x_m)| = \left| \frac{v_0}{\mu} \right|, \quad (3.89)$$

en este caso

$$\frac{4\Delta E}{L} \frac{x_m}{L} \left(\frac{x_m^2}{L^2} - 1 \right) = \frac{v_0}{\mu}. \quad (3.90)$$

La solución real a esta ecuación es

$$x_m = \frac{2 \Delta E L^2}{3^{\frac{1}{3}} \left[3^2 \Delta E^2 L^4 \frac{v_0}{\mu} + 3^{\frac{1}{2}} \left(3^3 \Delta E^4 L^8 \frac{v_0^2}{\mu^2} - 4^3 \Delta E^6 L^6 \right)^{\frac{1}{2}} \right]^{\frac{1}{3}}} + \frac{\left[3^2 \Delta E^2 L^4 \frac{v_0}{\mu} + 3^{\frac{1}{2}} \left(3^3 \Delta E^4 L^8 \frac{v_0^2}{\mu^2} - 4^3 \Delta E^6 L^6 \right)^{\frac{1}{2}} \right]^{\frac{1}{3}}}{2 \cdot 3^{\frac{2}{3}} \Delta E}. \quad (3.91)$$

Ahora bien, en este dominio las partículas pueden tener dos tipos de regiones de desplazamiento difusivo dependiendo de si la fuerza autopropulsiva es suficiente o no para superar la fuerza de atrapamiento entre ambos pozos

1. Desplazamiento libre entre ambos pozos, es decir, pueden superar la barrera ΔE que los separa (ver figura 3.7).
2. Desplazamiento confinado a uno u otro pozo, es decir, las partículas no pueden superar la barrera ΔE que los separa. En este caso se refieren dichos puntos como $\pm x_{mi}$ y $\pm x_{md}$ para el pozo izquierdo o derecho, respectivamente (ver figura 3.7).

En el presente análisis el interés se centra en el primer tipo de movimiento, a saber, las partículas desplazándose libremente entre ambos pozos, lo cual se refiere al caso en que la fuerza autopropulsiva es mayor a la fuerza de atrapamiento que suponen ambos pozos, es decir, precisamente cuando se cumple la condición (3.88).

Antes de comenzar con este análisis conviene adimensionalizar el sistema, utilizando precisamente estos puntos x_m , es decir

$$\bar{x} = \frac{x}{x_m}. \quad (3.92)$$

Con esta adimensionalización el dominio donde pueden tener lugar los dos tipos de regiones de desplazamiento, ahora se puede expresar como $\bar{x} \in [-1, 1]$.

Volviendo a la condición (3.88) y su relación al movimiento libre entre ambos pozos, al adimensionalizar la variable espacial, la fuerza de atrapamiento se puede expresar en términos de \bar{x} y un parámetro η (cuyo significado se clarificará en los siguientes párrafos), de la siguiente manera

$$f_{atrapamiento}(\bar{x}, \eta) = -\frac{4\Delta E}{L} \frac{\zeta(\eta)}{\sqrt{3}} \bar{x} \left[\frac{\zeta^2(\eta)}{3} \bar{x}^2 - 1 \right], \quad (3.93)$$

donde $\zeta(\eta)$ es una función de η que se definirá posteriormente, no siendo necesaria para el presente análisis. Con la expresión anterior la condición (3.88) se puede expresar como

$$\left| -\frac{4\Delta E}{L} \frac{\zeta(\eta)}{\sqrt{3}} \bar{x} \left[\frac{\zeta^2(\eta)}{3} \bar{x}^2 - 1 \right] \right| < \left| \frac{v_0}{\mu} \right|. \quad (3.94)$$

Para estudiar las consecuencias de dicha condición nos remitimos a la figura 3.8, donde se muestran las gráficas de ambas fuerzas, recordando que en los puntos $\bar{x} = \pm 1$ las fuerzas son iguales y la fuerza autopropulsiva se mantiene constante. Los dos tipos de regiones de movimiento surgirán con referencia a si la fuerza de atrapamiento definida anteriormente es mayor o menor a la fuerza de autopropulsión (constante) dada por el cociente entre la velocidad de autopropulsión v_0 y la movilidad de la partícula en el medio μ .

En (3.8a), con $\eta = 6$, el dominio adimensionalizado $\bar{x} \in [-1, 1]$ se divide en dos regiones de movimiento debido a que la fuerza autopropulsiva (constante) es menor a la fuerza de atrapamiento, siendo dichas regiones: $\bar{x} \in [-1, -\bar{x}_{ml}]$ y $\bar{x} \in [\bar{x}_{ml}, 1]$ para el movimiento confinado al pozo izquierdo y derecho, respectivamente.

En el caso de (3.8b), con $\eta = 0,1$ la situación es diferente ya que la fuerza autopropulsiva (constante) siempre es mayor o igual a la de atrapamiento, permitiéndose con ello el tránsito entre ambos pozos del potencial definiendo una sola región de movimiento a lo largo de todo el dominio $\bar{x} \in [-1, 1]$.

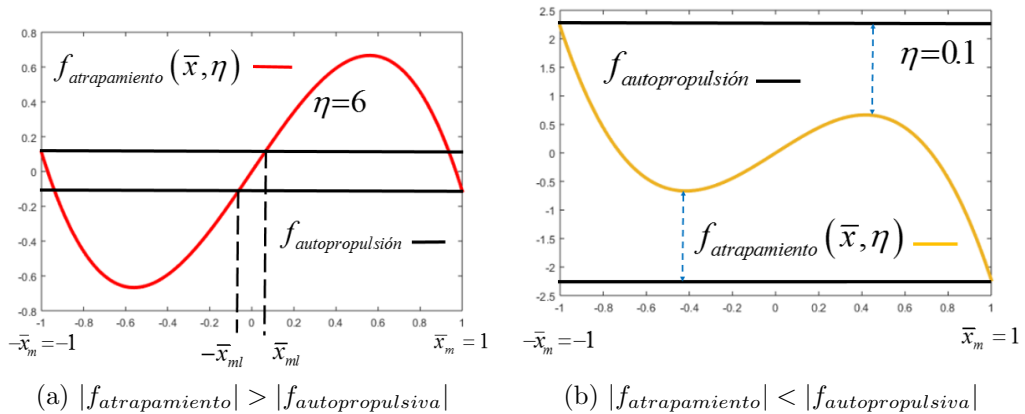


Figura 3.8: Dos tipos de regiones de movimiento dependiendo si la fuerza autopropulsiva es menor o mayor a la de atrapamiento.

Para determinar matemáticamente si la fuerza autopropulsiva es mayor o no que la de atrapamiento lo importante es conocer los puntos mínimos y

máximos en la fuerza de atrapamiento ya que ellos dan cuenta de la magnitud absoluta de dicha fuerza. Estos puntos se encuentran trivialmente derivando $f(\bar{x}, \eta)$, estando los mismos en función del parámetro η

$$\bar{x}_{max,min} = \pm \frac{1}{\zeta(\eta)}. \quad (3.95)$$

Si se sustituyen estos puntos en la condición (3.94), referida al movimiento libre entre ambos pozos, se obtiene

$$\sqrt{\frac{4^3}{3^3} \frac{\Delta E}{L} \frac{\mu}{v_0}} \leq 1. \quad (3.96)$$

De la cual se define el parámetro η utilizado anteriormente para fines de generalidad en las descripciones cualitativas

$$\eta \equiv \sqrt{\frac{4^3}{3^3} \frac{\Delta E}{L} \frac{\mu}{v_0}}. \quad (3.97)$$

Por tanto la condición en su forma más simple se puede expresar como

$$\eta \leq 1. \quad (3.98)$$

Esta condición nos garantiza que para valores de $\eta \leq 1$ las partículas se desplazarán libremente entre ambos pozos pudiendo superar la barrera de energía entre ambos. Para valores $\eta > 1$ las partículas quedan confinadas a difundirse en uno u otro pozo. En el caso de la condición matemática (3.87) (equivalente a la expresada en términos físicos), por supuesto, la densidad de probabilidad estará bien definida siempre para estos valores, lo cual se explica si tomamos en cuenta que como se verá a continuación la densidad de probabilidad se normaliza en el dominio $[-1, 1]$. Por otro lado para $\eta > 1$ surgen dos regiones independientes donde se difunden las partículas por lo que en realidad se estaría hablando de dos densidades de probabilidad, una por cada región, requiriendo así una normalización diferente para cada caso.

En la figura 3.9 se muestran las fuerzas de atrapamiento de distintos valores de $\eta < 1$ superando en todos los casos la fuerza autopropulsiva a la de atrapamiento; con $\eta = 2$ ya no es posible esto.

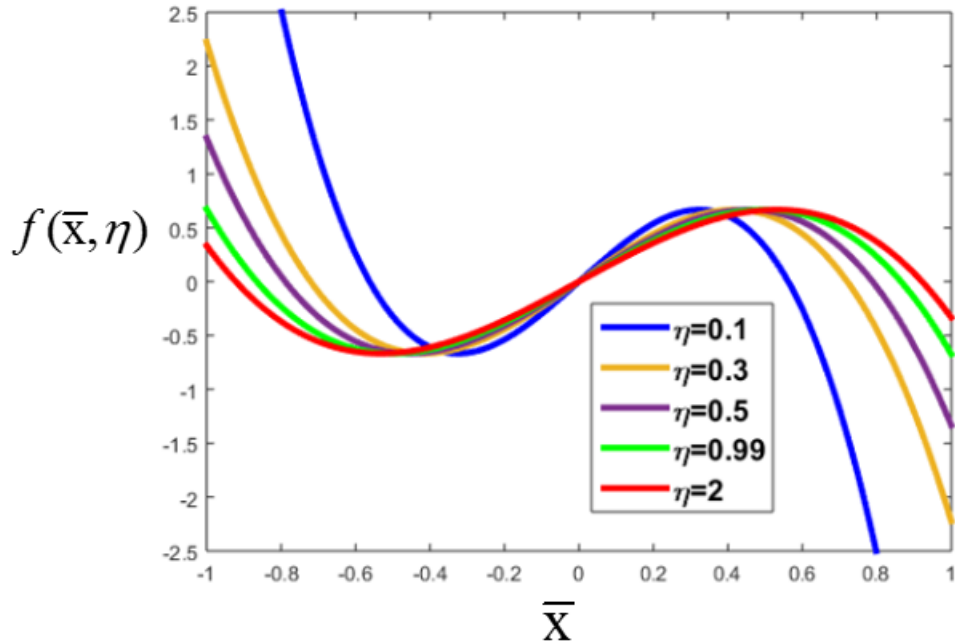


Figura 3.9: Fuerza de atrapamiento en función del parámetro η . Aunque aquí no se muestra explícitamente la fuerza autopropulsiva es claro que para $\eta < 1$ ésta última sería mayor que las fuerzas de atrapamiento. Para $\eta = 2$ esto no se cumple y la fuerza autopropulsiva es menor a la de atrapamiento.

Ahora observemos la expresión (3.97) para dar un significado físico al parámetro adimensional η . Este parámetro nos da cuenta de la forma que adquiere el potencial a través de qué tan pronunciada es la barrera de energía ΔE . Observando con cuidado los términos en éste se puede identificar que el denominador $v_0 L \mu^{-1}$ tiene unidades de energía, interpretándose por tanto como el trabajo que realiza la partícula al viajar la distancia característica L (ver Figura 3.7). Por tanto η relaciona la barrera de energía que separa ambos pozos con el trabajo mencionado anteriormente

$$\eta = \frac{\text{barrera de energía}}{\text{trabajo al recorrer distancia entre mínimo y } \Delta E \text{ máxima.}}$$

Continuando con el desarrollo de la expresión para la densidad de probabilidad, el parámetro η se puede utilizar para caracterizar varias cantidades tal como en su momento se indicó para la fuerza de atrapamiento, clarificándose en adelante la forma de dicha expresión. Primero, la solución para los valores

x_m se puede expresar en términos de η de la siguiente manera

$$x_m = \frac{L}{\sqrt{3}} \left[\frac{\eta^{\frac{1}{3}}}{\left(1 + \sqrt{1 - \eta^2}\right)^{\frac{1}{3}}} + \frac{\left(1 + \sqrt{1 - \eta^2}\right)^{\frac{1}{3}}}{\eta^{\frac{1}{3}}} \right]. \quad (3.99)$$

Dicho valor se utiliza para adimensionalizar la variable espacial como se hizo anteriormente mostrándose ahora explícitamente en la expresión para la densidad de probabilidad, de lo cual se obtiene

$$P_{\text{eq}}(\bar{x}) = \frac{\mathcal{N}(0)}{1 - \frac{3^3}{4}\eta^2\bar{x}_m^2\bar{x}^2(\bar{x}_m^2\bar{x}^2 - 1)^2} \exp \left\{ -4\bar{x}_m^2 \frac{\mu\alpha\Delta E}{v_0^2} \int_0^{\bar{x}} d\bar{x}' \frac{\bar{x}'(\bar{x}_m^2\bar{x}'^2 - 1)}{\left[1 - \frac{3^3}{4}\eta^2\bar{x}_m^2\bar{x}'^2(\bar{x}_m^2\bar{x}'^2 - 1)^2\right]} \right\}, \quad (3.100)$$

donde se ha utilizado $\bar{x}_m = x_m/L$. En este punto surge otro parámetro adimensional que como se verá, caracteriza el movimiento persistente de la partícula activa. Se define este parámetro χ como

$$\chi \equiv \frac{\mu\alpha\Delta E}{v_0^2}. \quad (3.101)$$

Veámos ahora qué nos relaciona este parámetro. En él aparece el cociente v_0/α que tiene dimensiones de longitud. Dicho término se puede considerar como la longitud de persistencia de la partícula debido a que contiene la tasa de cambio en la dirección α . Por otro lado, el cociente $\frac{\mu\Delta E}{v_0}$ también tiene unidades de longitud. Como podemos ver está relacionado al término que mencionábamos en η referido al trabajo que realizaría la partícula al recorrer la distancia característica L . Así, dicho cociente se puede considerar la longitud característica del sistema. Por tanto el parámetro adimensional χ nos relaciona

$$\chi = \frac{\text{longitud característica}}{\text{longitud de persistencia}}. \quad (3.102)$$

Definidos los dos parámetros adimensionales η y χ que caracterizan la distribución de probabilidad, ésta se puede reescribir como

$$P_{\text{eq}}(\bar{x}) = \frac{\mathcal{N}(0)}{1 - \frac{9}{4}\eta^2\zeta^2(\eta)\bar{x}^2\left[\frac{1}{3}\zeta^2(\eta)\bar{x}^2 - 1\right]^2} \exp \left\{ -\frac{4}{3}\chi\zeta^2(\eta) \int_0^{\bar{x}} d\bar{x}' \frac{\bar{x}'\left(\frac{1}{3}\zeta^2(\eta)\bar{x}'^2 - 1\right)}{\left[1 - \frac{9}{4}\eta^2\zeta^2(\eta)\bar{x}'^2\left[\frac{1}{3}\zeta^2(\eta)\bar{x}'^2 - 1\right]^2\right]} \right\}, \quad (3.103)$$

donde por simplificación se define la función $\zeta(\eta)$ utilizada en el análisis inicial en la expresión para la fuerza de atrapamiento

$$\zeta(\eta) \equiv \frac{\eta^{\frac{1}{3}}}{\left(1 + \sqrt{1 - \eta^2}\right)^{\frac{1}{3}}} + \frac{\left(1 + \sqrt{1 - \eta^2}\right)^{\frac{1}{3}}}{\eta^{\frac{1}{3}}}. \quad (3.104)$$

La integral en el argumento de la función exponencial no tiene una solución exacta. Además la distribución requiere ser normalizada en el intervalo $[-1, 1]$. Para obtener gráficamente estas distribuciones de probabilidad se utiliza el software Mathematica. En éste primero se resuelve numéricamente la integral en el término exponencial y posteriormente se obtiene la constante de normalización integrando también numéricamente la distribución de probabilidad en el intervalo de confinamiento.

Este análisis difiere por supuesto de aquél realizado para el potencial armónico ya que ahora dos parámetros adimensionales caracterizan las distribuciones de probabilidad obtenidas.

En las figuras 3.10 y 3.12 se muestran las distribuciones de probabilidad para valores crecientes de η , variando en cada caso los valores de parámetro χ también en forma creciente.

Refiriéndonos a la figura 3.11 podemos ver claramente que los máximos en las distribuciones de probabilidad se desplazan a las regiones en las que es mínimo el potencial. Esta variación es esperada debido a que como se mencionó previamente η nos da información acerca de la forma que adquiere el potencial. La acumulación de partículas en estos mínimos de potencial se explica con más detalle a continuación.

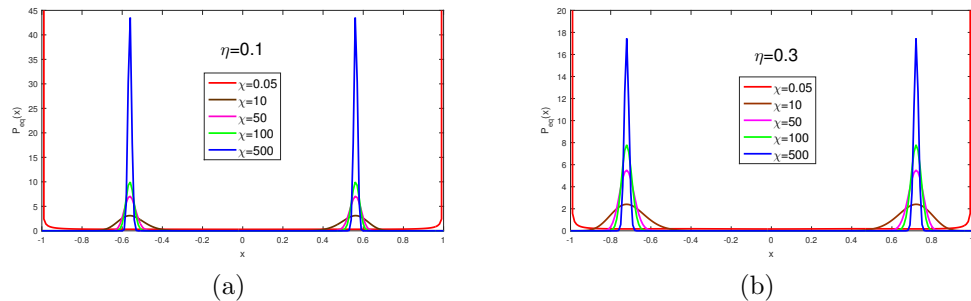


Figura 3.10: Conforme el valor de η aumenta, los mínimos del potencial se desplazan haciéndolo con ellos también las distribuciones de probabilidad.

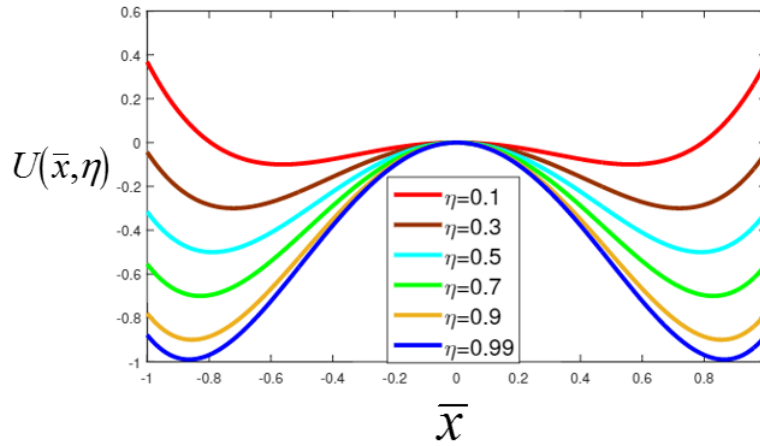


Figura 3.11: Potencial de doble pozo normalizado.

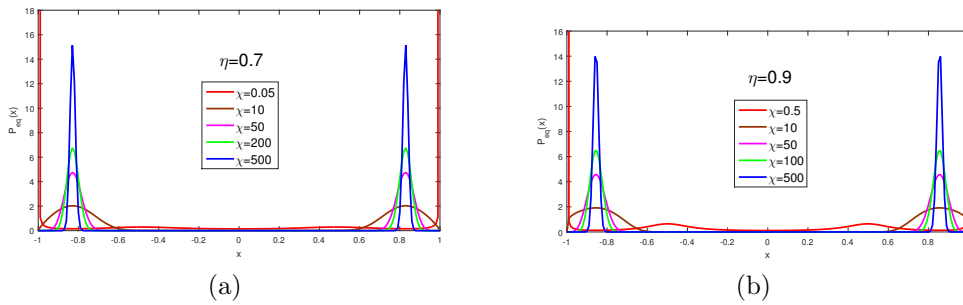


Figura 3.12: Conforme el valor de η aumenta, los mínimos del potencial se desplazan haciéndolo con ellos también las distribuciones de probabilidad.

Para la figura 3.11, se utilizó la expresión

$$U(\bar{x}, \eta) = \sqrt{\frac{3^3}{4^3}} \frac{v_0}{\mu} L \eta \left[\frac{1}{9} \zeta^4(\eta) \bar{x}^4 - \frac{2}{3} \zeta^2(\eta) \bar{x}^2 \right], \quad (3.105)$$

siendo éste el potencial en términos del parámetro η y la dimensión espacial adimensional. En dicha gráfica se ha supuesto que $\frac{v_0}{\mu} L = 1$ ya que solamente se busca indicar cómo varía el potencial de atrapamiento en función del parámetro η .

Ahora bien, con respecto al parámetro χ se pueden observar dos tipos de comportamientos conforme el valor de η aumenta. En la figura 3.10 el comportamiento no es notoriamente variable conforme varían los valores de χ , sin embargo remitiéndonos a la figura 3.12, en (b), correspondiente a $\eta = 0,9$ se comienza a percibir un comportamiento distinto para valores de

χ pequeños, marcadamente en $\chi = 0,05$. En adición a la acumulación en las paredes, aparece un pico más allá del mínimo de potencial. Para estudiar ambos comportamientos nos referimos a las figuras 3.13 y 3.14 siendo $\eta = 0,5$ y $\eta = 0,99$ valores característicos para cada uno.

En este punto el análisis se refiere a la figura 3.13 donde se aprecia el primer tipo de comportamiento parecido a aquél observado para el potencial armónico. El análisis se hace con base en el parámetro χ tomando en cuenta el efecto de la longitud de persistencia v/α y la longitud característica $\frac{\mu\Delta E}{v_0}$ en dicho valor.

El análisis no dista de aquél hecho para el potencial armónico ya que es evidente que este parámetro χ relaciona, al igual que β , las longitudes característica y de persistencia del sistema. En este caso también se observa que para valores pequeños de χ , es decir aquellos en que la longitud de persistencia es del orden de la longitud característica, es más probable encontrar a las partículas en los linderos de las paredes de potencial, siendo no-gaussianas las distribuciones de probabilidad. Por otro lado conforme se aumenta el valor de χ la longitud de persistencia disminuye respecto a la longitud característica. Con esto es más probable encontrar a las partículas cerca de las regiones centrales en ambos pozos del potencial ya que el continuo cambio en su dirección vuelve poco probable encontrarlas en las zonas cercanas a las fronteras.

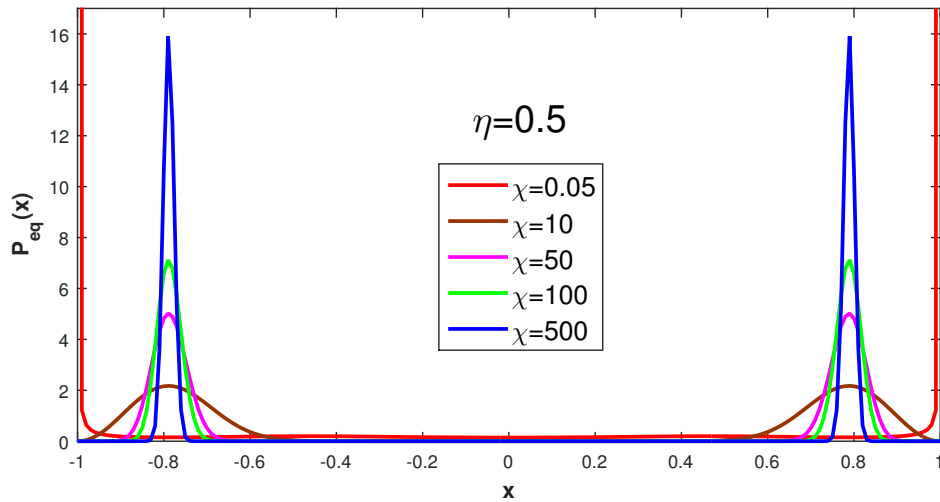


Figura 3.13: Distribuciones de probabilidad de «equilibrio» para $\eta = 0,5$ y valores crecientes de χ .

Ahora se estudia el segundo tipo de comportamiento refiriéndonos a la figura 3.14. Como se adelantaba previamente, conforme aumenta el valor de

η surge un comportamiento distinto, teniéndose acumulación en dos zonas distintas para valores pequeños de χ . Una zona cercana a las paredes del potencial (observada previamente) y otra alejada en sentido contrario a los mínimos de potencial. Recordemos que η debe satisfacer $\eta \leq 1$, por tanto $\eta = 0,99$ se corresponde con un valor cercano al límite permitido para que la partícula se mueva libremente entre ambos pozos del potencial. Con respecto a valores grandes de χ el análisis sería el mismo que para la figura 3.13,

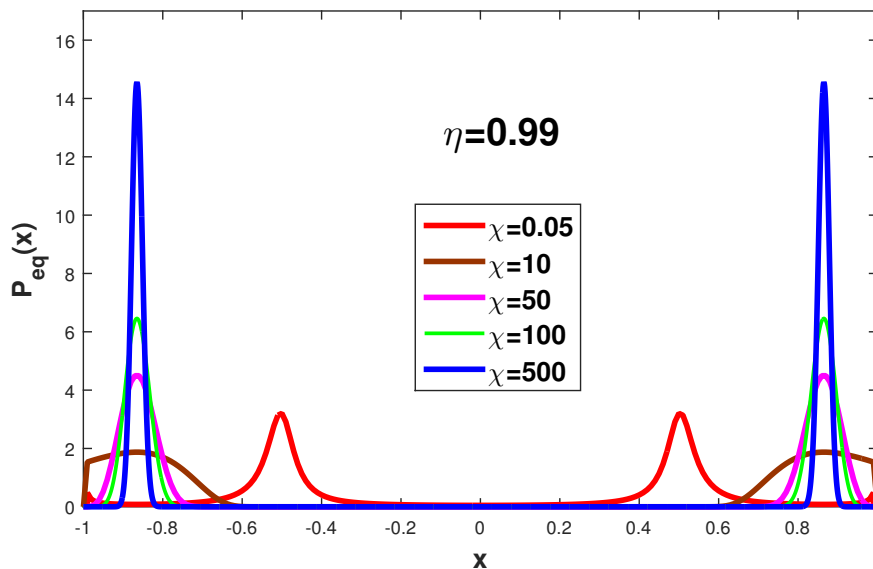


Figura 3.14: Distribuciones de probabilidad de «equilibrio» para $\eta = 0,99$ y valores crecientes de χ .

En este caso el análisis se remite a valores pequeños, e.g. $\chi = 0,05$ (persistencia grande) donde es manifiesta la acumulación en las fronteras del sistema, comportamiento característico de los sistemas activos.

De la misma manera que para el potencial armónico, estos comportamientos se pueden explicar con base al perfil de temperatura efectiva del sistema. En la figura 3.15 se observa el contraste entre dicho perfil y las distribuciones para longitudes de persistencia grandes.

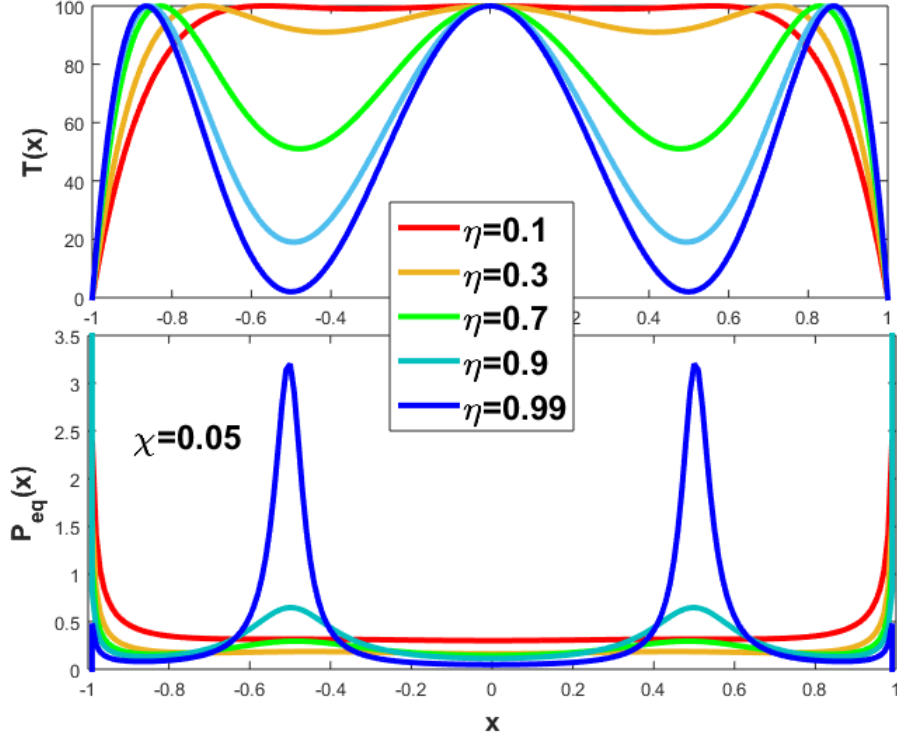


Figura 3.15: Constraste entre el perfil de temperatura efectiva en función del parámetro η y las distribuciones de probabilidad caracterizadas por persistencia grande $\chi = 0,05$ en función también de η creciente.

La temperatura efectiva de este sistema está dada por

$$\mathcal{T}(x) = T_0 \left[1 - \frac{\mu^2}{v_0^2} \frac{16\Delta E^2}{L^2} \frac{x^2}{L^2} \left(1 - \frac{x^2}{L^2} \right)^2 \right], \quad (3.106)$$

la cual expresada en su forma normalizada, $T(\bar{x}, \eta)$, es

$$T(\bar{x}, \eta) = T_0 \left\{ 1 - \frac{9}{4} \eta^2 \zeta^2(\eta) \bar{x}^2 \left[1 - \frac{1}{3} \zeta^2(\eta) \bar{x}^2 \right]^2 \right\}. \quad (3.107)$$

A diferencia del caso armónico aquí el perfil de temperatura tiene regiones «frías» y «calientes» intercaladas debido a la aparición de nuevos máximos y mínimos en el perfil. Estudiemos con detalle la figura 3.15.

Debido a que se cumple la condición $\eta \leq 1$, las partículas se difunden a lo largo de toda la región de confinamiento. Naturalmente para movimientos cuya longitud de persistencia es muy grande, la exploración espacial es más

amplia alcanzándose fácilmente la estacionariedad. Conforme las partículas activas se desplazan en todo el intervalo de confinamiento, son afectadas en mayor o menor grado por el potencial externo; así, cuando se acercan tanto a las fronteras externas en $[-1,1]$ y a la barrera central que divide ambos pozos, éstas ven ralentizado su movimiento lo cual está asociado a temperaturas efectivas menores. Es con base en esto que se puede interpretar la aparición de los nuevos puntos de acumulación en las distribuciones, de hecho conforme esta barrera central aumenta, i.e., en el caso en que $\eta > 1$, las partículas percibirían simplemente un potencial armónico siendo estos puntos de acumulación los análogos a una de las paredes del sistema en el caso armónico. Por tanto no es de extrañar que cuando el sistema alcanza el estado estacionario sea más probable encontrar a las partículas en las regiones cercanas a las paredes o barreras de energía donde éstas pasan más tiempo debido a la ralentización de su movimiento.

Caso pasivo: difusión y potencial efectivo

La difusión efectiva está dada por

$$\mathcal{D}(x) = \frac{v_0^2}{\alpha} \left[1 - \frac{\mu^2}{v_0^2} \frac{16\Delta E^2}{L^2} \frac{x^2}{L^2} \left(1 - \frac{x^2}{L^2} \right)^2 \right]. \quad (3.108)$$

Utilizando esta difusión en (3.45), adimensionalizando x con el valor de los puntos de confinamiento x_m y t con un tiempo asociado a estos $t_m = x_m/v_0$, se obtiene una expresión finalmente solo en términos de las variables de espacio y tiempo sin dimensiones y los parámetros característicos del sistema η y χ

$$\begin{aligned} \Delta \bar{x} = & \frac{3}{2} \eta \zeta(\eta) \bar{x} \left(1 - \frac{1}{3} \zeta^2(\eta) \bar{x}^2 \right) \Delta \bar{t} \\ & + \sqrt{[\chi \zeta]^{-1} \frac{9}{4} \eta \left[1 - \frac{9}{4} \eta^2 \zeta^2(\eta) \bar{x}^2 \left(1 - \frac{1}{3} \zeta^2(\eta) \bar{x}^2 \right)^2 \right]} \Delta \bar{t} \Psi. \end{aligned} \quad (3.109)$$

Las distribuciones de probabilidad obtenidas a partir de la solución numérica de esta ecuación se muestran en las figuras 3.16 y 3.17

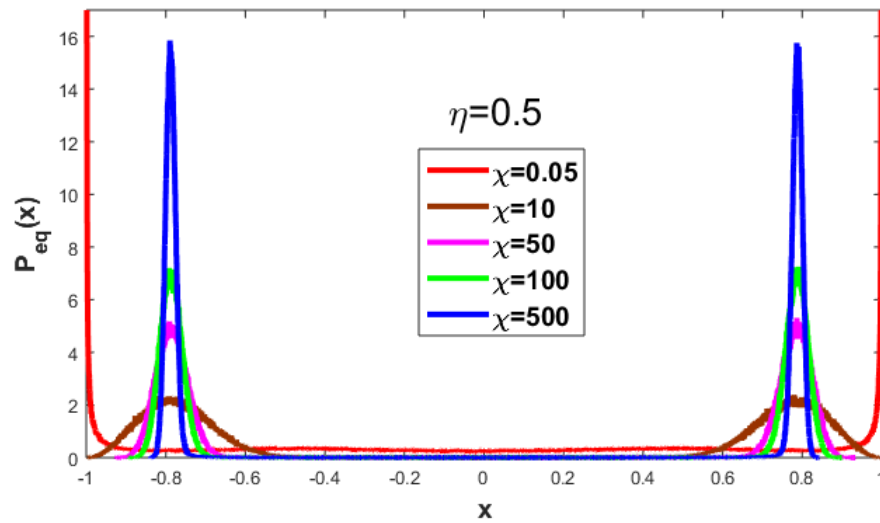


Figura 3.16: Distribuciones de probabilidad obtenidas con $\eta = 0,5$ y valores crecientes de χ para partículas Brownianas pasivas en un medio inhomogéneo no isotérmico.

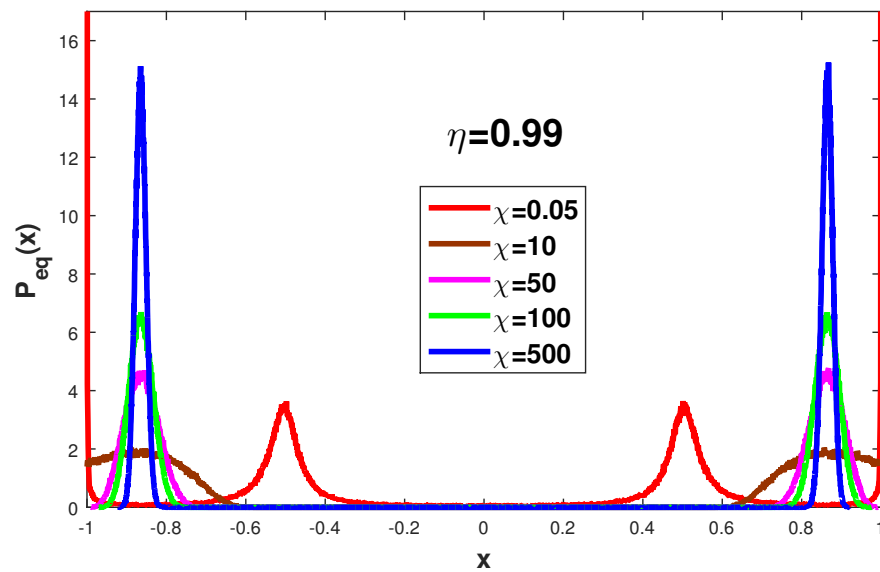


Figura 3.17: Distribuciones de probabilidad obtenidas con $\eta = 0,99$ y valores crecientes de χ para partículas Brownianas pasivas en un medio inhomogéneo no isotérmico.

A continuación se dará una interpretación a las figuras (3.16) y (3.17) a partir de los conceptos del potencial efectivo y las fuerzas de atrapamiento y termoforética. Del mismo modo que en el potencial armónico, este sistema

se corresponde físicamente con partículas brownianas pasivas difundiéndose en un potencial efectivo dado por la expresión (3.29), la cual para este caso es

$$U_{eff}(\bar{x}, \eta, \chi) = U(\bar{x}, \eta) + \frac{\Delta E}{\chi} \left\{ 1 - \frac{9}{4} \eta^2 \zeta^2(\eta) \bar{x}^2 \left[1 - \frac{1}{3} \zeta^2(\eta) \bar{x}^2 \right]^2 \right\}. \quad (3.110)$$

Como se vió en la sección 3.4, dicho potencial efectivo esta compuesto por una parte de atrapamiento y una termoforética, donde todos están asociados a una fuerza.

La fuerza termoforética para este sistema es

$$f_{tf}(x) = 2 \frac{k_B T_0}{L} \left(\frac{4\mu \Delta E}{v_0 L} \right)^2 \frac{x}{L} \left(\frac{x^2}{L^2} - 1 \right) \left(3 \frac{x^2}{L^2} - 1 \right). \quad (3.111)$$

Esta fuerza expelle a las partículas hacia las fronteras del sistema ($\pm x_m$) y los mínimos de temperatura efectiva («regiones frías») en $\pm L/\sqrt{3}$. Por el contrario, la fuerza de atrapamiento tiende a mantener a las mismas en los mínimos del potencial, i.e., los puntos ($\pm L$). Dicho efecto competitivo es descrito por cierto valor crítico.

Este valor está relacionado con la estabilidad del potencial efectivo, i.e., es un punto de inflexión que cambia la concavidad de este último, lo cual tiene como consecuencia la aparición de nuevos puntos críticos locales en función del valor que adquiere el mismo. De esta manera marca la transición del comportamiento con efectos de persistencia bajos (gaussiano) a aquél con efectos de persistencia significativos (no-gaussiano). Por supuesto este valor se refiere al parámetro χ que da cuenta de los efectos de persistencia en el sistema, el cual se puede definir de manera equivalente como

$$\chi = \frac{\Delta E}{k_B T_0}. \quad (3.112)$$

A partir de la expresión para el potencial efectivo se puede encontrar el punto de inflexión correspondiente al valor crítico, el cual viene dado por

$$\chi_{crit} = \frac{27}{4} \eta^2. \quad (3.113)$$

Los comportamientos difusivos en función de este valor crítico son:

- i) Caso supercrítico ($\chi > \chi_{crit}$) Los efectos de persistencia no son perceptibles, por lo que la distribución de probabilidad es gaussiana. El potencial efectivo tiene dos mínimos locales que coinciden con aquellos del potencial de atrapamiento $U(x)$, i.e., los puntos $x = \pm L$. Por ello las partículas tienden a encontrarse con mayor probabilidad en dichos puntos estables de equilibrio.

- ii) Caso degenerado ($\chi = \chi_{\text{crit}}$) Se trata de la transición al siguiente estadio no habiendo puntos críticos locales.
- iii) Caso subcrítico ($\chi < \chi_{\text{crit}}$) Los efectos de persistencia son marcados, así, las distribuciones de probabilidad correspondientes son no-gaussianas. Los mínimos locales para el caso supercrítico desaparecen dando paso a otros dos nuevos en $x = \pm L \left(\frac{8}{27} \frac{\chi}{\eta^2} + 1 \right)^{\frac{1}{2}} / \sqrt{3}$.

Dicho lo anterior observemos cómo se manifiesta este valor crítico en las distribuciones de probabilidad para este sistema. En la figura 3.18 se muestra la transición de las distribuciones gaussianas con acumulación en los mínimos de potencial (caso supercrítico) a aquellas descritas por distribuciones no-gaussianas donde las partículas tienden a acumularse en las fronteras y regiones cercanas a la barrera que separa ambos pozos, todo lo anterior debido al cambio en la estabilidad de los puntos críticos en el potencial efectivo.

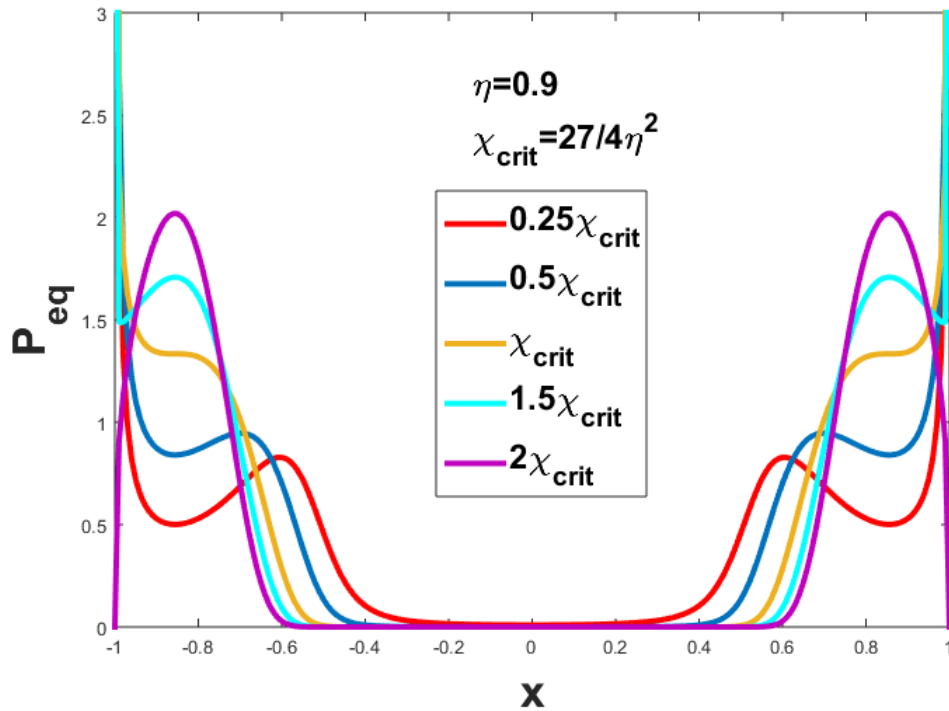


Figura 3.18: Transición de comportamiento gaussiano (efectos de persistencia no significativos) a comportamiento no-gaussiano (marcados efectos de persistencia), vía el valor crítico χ_{crit} .

Caso activo vs caso pasivo

Al igual que en el potencial armónico, las distribuciones de probabilidad estacionarias obtenidas para partículas activas exhibiendo patrones de movimiento «run-and-tumble» (suponiendo $J_{st} = 0$) y aquellas para partículas Brownianas pasivas difundiéndose en un medio no isotérmico son exactamente iguales como se puede observar en las figuras 3.19 y 3.20.

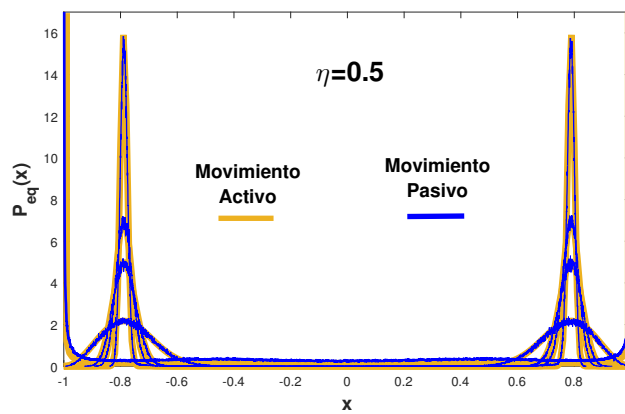


Figura 3.19: Comparación de las distribuciones de probabilidad obtenidas para partículas activas que exhiben patrones de movimiento «run-and-tumble» (se supone estacionariedad y $J_{st} = 0$) y aquellas para partículas pasivas moviéndose en un medio efectivo inhomogéneo.

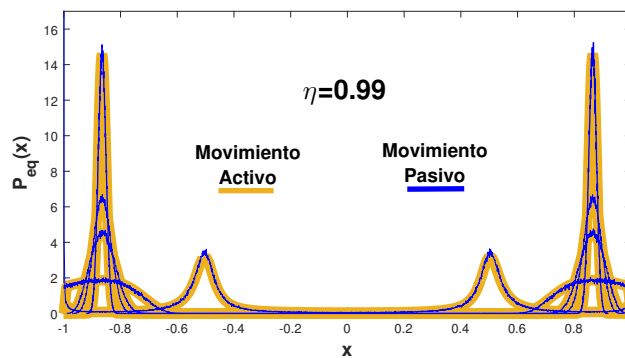


Figura 3.20: Comparación de las distribuciones de probabilidad obtenidas para partículas activas que exhiben patrones de movimiento «run-and-tumble» (se supone estacionariedad y $J_{st} = 0$) y aquellas para partículas pasivas moviéndose en un medio efectivo inhomogéneo.

3.6. Distribuciones no-Boltzmann-Gibbs: inhomogeneidad

Como se constató en las distribuciones de equilibrio para partículas activas que exhiben dinámica «run-and-tumble», éstas no se corresponden con aquellas que describen desde el punto de vista estadístico sistemas en equilibrio termodinámico (Boltzmann-Gibbs). Retomemos estas soluciones dadas por la expresión

$$P_{\text{eq}}(x) = \frac{\mathcal{N}(0)}{\mathcal{D}(x)} \exp \left\{ \int_0^x dx' \frac{\mathcal{V}_{\text{drift}}(x')}{\mathcal{D}(x')} \right\}. \quad (3.114)$$

¿Cuál es la característica de estas distribuciones no-Boltzmann-Gibbs? Es evidente que la diferencia radica en la dependencia espacial del término que se ha identificado con la difusión. Tomando en cuenta esto se puede establecer que en este tipo de sistemas activos en la mayoría de las situaciones no se puede identificar una cantidad homogénea que describa globalmente al sistema, caso contrario a aquél de los sistemas en equilibrio termodinámico donde sí se identifican dichas cantidades uniformes como la temperatura homogénea del baño térmico en el caso de movimiento browniano.

Ejemplo de esto último es el llamado límite difusivo, en el cual, tomando los límites, $v \rightarrow \infty$ y $\alpha \rightarrow \infty$, se puede considerar el término $D_{\text{free}} = \frac{v_0^2}{\alpha}$ constante surgiendo con ello una distribución del tipo Boltzmann-Gibbs. En el otro extremo llamado régimen de persistencia se encuentran las distribuciones no-Boltzmann-Gibbs (3.114).

Ahora bien, esta dependencia espacial descrita por la difusión efectiva, $\mathcal{D}(x)$, físicamente está relacionada con el hecho de que se ha supuesto que las rapidezces de la partícula a la derecha y a la izquierda, $v_{R,L}(x)$, se encuentran sujetas a la influencia del potencial externo $U(x)$, el cual cambia la rapidez de autopropulsión v_0 que mantiene la partícula al difundirse de acuerdo a

$$v_{R,L}(x) = v_0 \mp \mu U'(x). \quad (3.115)$$

Por tanto, es esta inhomogeneidad espacial conferida al movimiento de la partícula a través de un potencial externo que la confina, lo que origina dicha dependencia espacial en el término que hemos identificado con una difusión efectiva. Así, es precisamente este «ingrediente» de inhomogeneidad el que da cuenta de la Física fuera de equilibrio en sistemas activos. Como se manifestó en los análisis de resultados en el capítulo anterior, la difusión efectiva relacionada a una temperatura efectiva inhomogénea explica el surgimiento de las distribuciones no-gaussianas características de sistemas activos diluidos unidimensionales.

3.7. Movilidad constante y el teorema de fluctuación-disipación local

En esta sección se trata una de las suposiciones más importantes en las que se basa el desarrollo anterior, a saber, la validez de la identificación

$$\mathcal{T}(x) = \frac{\mathcal{D}(x)}{\mu k_B}, \quad (3.116)$$

análoga al teorema de fluctuación-disipación local con la diferencia que en este caso la movilidad μ en el medio es uniforme. El teo fluctuación-disipación local para el caso de movimiento en el régimen sobreamortiguado (utilizado en el caso pasivo) está dada por [31]

$$D(x) = \frac{k_B T(x)}{\gamma(x)} = \mu(x) k_B T(x). \quad (3.117)$$

Dicha relación da cuenta del acoplamiento entre los efectos de respuesta en las partículas ante las perturbaciones del medio a nivel local. Es claro de esta expresión que el comportamiento de la movilidad de la partícula se encuentra acoplado al que tiene la temperatura local del medio. Nótese que en este caso esta temperatura se refiere a la temperatura usual medible en el sistema con un termómetro.

En el caso de la identificación hecha se ha precisado que tanto la difusión como la temperatura efectiva no se corresponden como tal con las definiciones usuales de éstas, más bien dan cuenta de las propiedades dinámicas estocásticas de las partículas y el medio en el caso activo y pasivo, de este modo se podría referir a esta temperatura/difusión como «estocástica». Desde un principio se estableció que el análisis hecho en este trabajo con referencia al movimiento activo se centraba en las consecuencias dinámicas (patrones de movimiento) propias de este tipo de sistemas. Esto implícitamente tiene detrás el no requerir los mecanismos microscópicos internos de conversión de energía que generan el movimiento autónomo, siendo visto en ese sentido como una «caja negra» donde sólo se da cuenta de las consecuencias de los procesos que tienen lugar en ella.

En este sentido es que se argumenta que la suposición hecha es plausible ya que ésta si bien se refiere al acoplamiento de la respuesta de la partícula ante las perturbaciones del medio, no lo hace con referencia a los mecanismos exactos a través de los cuales se acoplan los efectos de fluctuación y disipación, sino más bien a las consecuencias que tienen éstos tanto en la dinámica estocástica de la partícula como aquella del medio circundante.

Así la movilidad $\mu(x)$ por supuesto puede ser dependiente de la posición pero en nuestro caso ésta se puede suponer uniforme ya que debido a estos mecanismos internos en principio «desconocidos» las partículas mantienen una movilidad o constante de fricción γ constante que no siente dicho cambio en la temperatura del medio a pesar de que ésta realmente se encontraría en principio acoplada al perfil de temperatura variando espacialmente en cada punto.

Con referencia a lo anterior se plantea un ejemplo más intuitivo. Una partícula autopropulsada, a saber, una bacteria, en principio sujeta a las propiedades variables del medio podría mantener la misma velocidad de autopropulsión v_0 a través de por ejemplo la autorregulación de su metabolismo (proceso interno) acelerando o desacelerando el mismo en función de la energía requerida para mantener dicha velocidad. Así, en principio existe un complejo mecanismo de interconversión de energía a través de las fronteras entre la partícula y el medio en adición al proceso metabólico interno, que mantiene a la bacteria aproximadamente con velocidad constante. Sin embargo, un observador externo sólo vería que la bacteria se mueve a cierta velocidad aparentemente constante (consecuencia del proceso interno), pudiendo inferir a partir del desconocimiento de los mecanismos mencionados anteriormente, que la bacteria siente la misma fricción por parte del medio (γ uniforme) reflejado en la velocidad constante de la misma. La relación fluctuación-disipación local reflejaría el mecanismo exacto de acoplamiento entre la partícula y el medio, mientras que la identificación hecha nos da cuenta precisamente de este acoplamiento a partir de las consecuencias de la dinámica estocástica del mismo.

Capítulo 4

Conclusiones

Encontrar una descripción precisa que diera cuenta de la naturaleza fuera de equilibrio intrínseca en los sistemas activos a partir no de los mecanismos microscópicos de conversión de energía, sino en referencia a las propiedades del movimiento activo, fue la directriz del presente trabajo. Paralelamente, pero con íntima relación a dicha cuestión, se exploró una conexión entre el comportamiento difusivo de sistemas activos y pasivos. Ahora bien, esta conexión por supuesto no es general, más bien está sujeta a determinadas condiciones que particularizan tanto al sistema activo como al pasivo.

En el caso de movimiento activo todo el desarrollo y análisis se hizo con referencia al modelo matemático denominado «run-and-tumble» que da cuenta de los patrones de movimiento exhibidos por partículas activas encontrando su inspiración en el movimiento descrito por bacterias, a saber *E. coli*. En la dinámica probabilística descrita por dicho modelo a través de una ecuación de continuidad para la densidad de probabilidad, se supone que la corriente en esta ecuación es estacionaria y además nula $J_{st} = 0$, generando con ello las llamadas distribuciones de equilibrio. Físicamente se describe el movimiento en una dimensión de partículas activas sin interacción difundiéndose con movilidad constante μ sujetas a la influencia de un potencial externo $U(x)$.

Por otro lado en lo que concierne al movimiento pasivo lo que se estudió fue un sistema en el que partículas brownianas pasivas se difunden con movilidad constante μ en un medio inhomogéneo caracterizado por un perfil de temperatura efectiva $\mathcal{T}(x)$, bajo la influencia de un potencial efectivo externo $U_{eff}(x)$. El punto de conexión se establece a partir de la solución estacionaria que en ambos casos resulta ser equivalente, siendo la difusión/temperatura efectiva la cantidad clave que une ambos comportamientos.

La primera conclusión que resulta evidente al observar las figuras 3.6 para el potencial armónico y 3.19-3.20 para el potencial de doble pozo, es que las distribuciones en ambos casos se corresponden exactamente no pudiéndose

distinguir en última instancia si se trata del sistema activo o el pasivo una vez que han alcanzado la estacionariedad. ¿Por qué sucede esto? La respuesta subyace en que para el estado estacionario la forma de ambas distribuciones (pasiva y activa) es la misma, por lo que se pudo establecer un mapeo entre ambas a través de los términos de difusión y temperatura efectiva.

Lo anterior está íntimamente ligado a lo que ha sido la cuestión principal de este trabajo: ¿cuál es la marca de la Física fuera de equilibrio en sistemas activos explicada en términos de sus propiedades de movimiento? En el camino para responder a dicha pregunta se encontró un término que se identificó con una difusión efectiva

$$\mathcal{D}(x) = \frac{v_R(x)v_L(x)}{\alpha(x)}, \quad (4.1)$$

la cual escrita de manera explícita de acuerdo al modelo supuesto para las rapideces y la tasa de cambio de dirección, está dada por

$$\mathcal{D}(x) = \frac{v_0^2}{\alpha} \left\{ 1 - \frac{\mu^2}{v_0^2} \left[\frac{dU(x)}{dx} \right]^2 \right\}. \quad (4.2)$$

En dicho término se encuentran embebidas las propiedades características del movimiento activo: la autopropulsión v_0 y la longitud de persistencia relacionada a la tasa en el cambio de dirección α . Además, a través del modelo de rapideces se confiere dependencia espacial en este caso asociada al potencial que varía las condiciones de movimiento de la partícula en cada punto.

Este mismo término difusivo aparece en las distribuciones de equilibrio para el caso activo:

$$P_{\text{eq}}(x) = \frac{\mathcal{N}(0)}{\mathcal{D}(x)} \exp \left\{ \int_0^x dx' \frac{\mathcal{V}_{\text{drift}}(x')}{\mathcal{D}(x')} \right\}, \quad (4.3)$$

y, como se discutió en la sección 3.6, son precisamente este tipo de distribuciones no-Boltzmann-Gibbs las que describen al sistema activo como un sistema fuera de equilibrio, no pudiéndose identificar un parámetro global homogéneo, tal como la difusión o en su caso para un sistema que cumple fluctuación-disipación, una temperatura efectiva homogénea asociada.

Físicamente, que las rapideces dependan de la posición se relaciona al confinamiento, siendo el potencial dependiente de la posición el que afecta la velocidad de autopropulsión de la partícula. Así, la incorporación de esta inhomogeneidad a su movimiento da cuenta de la naturaleza fuera de equilibrio en las distribuciones no-Boltzmann-Gibbs, las cuales explican teóricamente

las observaciones usuales de acumulación de partículas en fronteras de confinamiento para sistemas activos descritas por distribuciones no-gaussianas.

Para sistemas activos la interpretación de las distribuciones de equilibrio se hizo con base en cómo se lleva a cabo la difusión de las partículas, siendo los términos de difusión y temperatura efectiva los que describen los efectos del confinamiento en las distintas zonas del potencial. En el caso del régimen browniano de baja persistencia (distribuciones gaussianas), las partículas tienden a acumularse en los puntos mínimos del potencial donde no sienten el efecto del confinamiento. Por otro lado, en el régimen de persistencia grande (no-gaussiano), la acumulación se observa en las zonas donde el atrapamiento es sentido con mayor fuerza por las partículas. Así, conforme la partícula explora la región de confinamiento, su movimiento difusivo se ve afectado por la presencia del potencial, disminuyendo la difusión efectiva en estas zonas. Por lo tanto es más probable encontrar a las partículas en zonas donde su difusión efectiva es pequeña, lo cual está relacionado a una disminución en la temperatura efectiva característica de las zonas que hemos llamado «frías».

Por otro lado, el hecho de que la inhomogeneidad describa este tipo de sistemas fuera de equilibrio también encuentra una interpretación en el contexto del sistema browniano pasivo. La distribución (4.3) se reescribió de tal manera que surgió un potencial efectivo compuesto por dos efectos que compiten entre sí: uno termoforético y uno de atrapamiento. Como se vió en el capítulo anterior, la fuerza termoforética se opone a la de atrapamiento, expeliendo a las partículas pasivas a las regiones donde por lo general se acumulan sus contrapartes activas, mientras que la fuerza de confinamiento tiende a mantenerlas en los puntos de equilibrio del potencial. Se encontró que la transición de un estado a otro queda descrita por cierto valor crítico relacionado a la estabilidad de los puntos críticos del potencial efectivo. Así, las partículas pasivas se acumulan en una u otra zona dependiendo de qué tanto prevalecen los efectos de persistencia sobre los de atrapamiento o viceversa, reflejado matemáticamente en el cambio en la estabilidad del potencial efectivo.

En otra dirección, a lo largo del desarrollo del trabajo se utilizó el término «difusión/temperatura efectiva», estando implícito detrás del mismo que éstas cantidades se encuentran relacionadas. El análisis alrededor de la suposición que relaciona ambas cantidades a través de una suerte de teorema de fluctuación-disipación se hizo con detalle en la sección 3.7. En torno a esto se puede afirmar que dicha justificación parece plausible dados los resultados teóricos obtenidos en acuerdo con aquellos experimentales, pero requiere una revisión más profunda, sobre todo en lo referente a la conexión con el mecanismo exacto que dé cuenta del teorema de fluctuación-disipación local

rigurosamente.

A modo de perspectiva se plantea la posibilidad de generar experimentalmente un perfil de temperatura que refleje aquellos obtenidos en el presente trabajo para cada potencial. Con esto se podría diseñar un experimento en el cual se pusieran a prueba los resultados teóricos tanto en el caso pasivo como el activo. El potencial de confinamiento plausiblemente se podría generar a través de un sistema de trampas ópticas [51].

Por otro lado, la conexión entre el caso activo y pasivo provee una herramienta de análisis simple para tratar sistemas activos unidimensionales. Como se vió sobre todo en el caso del potencial de doble pozo, una solución cerrada exacta de las integrales involucradas en la distribución de probabilidad así como su posterior normalización, no es posible, sino a través de la solución numérica. Por tanto, al constatar que el comportamiento difusivo es exactamente el mismo en ambos casos, resulta más fácil estudiar dichos sistemas activos a partir de las bien conocidas herramientas matemáticas utilizadas para sistemas pasivos, a saber, la simulación numérica de la ecuación de Langevin, donde se puede incluir un término de difusión tan extenso y complicado como se quiera, resultado de un potencial confinante igualmente complejo.

Para concluir, mencionar que el presente trabajo ha abordado la situación fuera de equilibrio de los sistemas de materia activa diluida desde una perspectiva diferente, a saber, el mapeo de los comportamientos difusivos en sistemas activos y pasivos unidimensionales. En un futuro cercano se busca explorar dicho enfoque para el caso de partículas con interacción y dimensiones superiores.

Apéndice A

Solución numérica de la ecuación de Langevin

A.1. Consideraciones matemáticas

La ecuación de Langevin, una ecuación diferencial estocástica homogénea en el tiempo se puede escribir en su forma integral como

$$x(t) = x(t_0) + \int_{t_0}^t ds a(x(s)) + \int_{t_0}^t d\Psi(s) b(x(s)). \quad (\text{A.1})$$

Por otro lado la diferencial de una función arbitraria $f[x(t), t]$ del proceso $x(t)$ está dada por la llamada fórmula de Ito, expresada como

$$df[x(t)] = \left\{ a[x(t), t] f'[x(t)] + \frac{1}{2} b[x(t), t]^2 f''[x(t), t] \right\} dt + b[x(t), t] f'[x(t)] d\Psi(t), \quad (\text{A.2})$$

donde ésta última se puede expresar en su forma integral como

$$f(x(s)) = f(x(t_A)) + \int_{t_A}^s ds' \left[a(x(s')) f'(x(s')) + \frac{1}{2} b(x(s'))^2 f''(x(s')) \right] + \int_{t_A}^s d\Psi(s') b(x(s')) f'(x(s')). \quad (\text{A.3})$$

Esta expresión nos recuerda a una expansión de Taylor para una variable y vuelve posible una solución iterativa en la cual los términos $a(x(s))$ y $b(x(s))$ en A.1 se sustituyen por términos que incluyen $a(s(0))$ y un «residuo». Este procedimiento se puede realizar con relación a varios órdenes. En este caso

se utiliza la aproximación de menor orden, siendo conocido como un método Euleriano. En dicha aproximación $t_a \rightarrow t_0$; donde despreciando las integrales en A.3, se obtiene directamente el algoritmo de Euler explícito

$$x(t) \approx x(0) + a(x(t_0))(t - t_0) + b(x(t_0))[\Psi(t) - \Psi(t_0)]. \quad (\text{A.4})$$

En la implementación del algoritmo se considera un intervalo de tiempo $(0, T)$ dividido en N subintervalos de tamaño $\tau \equiv \frac{T}{N}$ en puntos $\tau_n = n\tau$. De esta manera la función $x(t)$ se evalúa en los puntos

$$\tau_0, \tau_1, \tau_2, \tau_3, \dots, \tau_{N-1}, \tau_N, \quad (\text{A.5})$$

siendo los incrementos del ruido estocástico

$$\Delta\Psi_n = \Psi(\tau_{n+1}) - \Psi(\tau_n). \quad (\text{A.6})$$

Así, las soluciones para el algoritmo se pueden escribir como

$$x_{n+1} = x_n + a_n\tau + b_n\Delta\Psi_n, \quad (\text{A.7})$$

$$a_n = a(x_n), \quad (\text{A.8})$$

$$b_n = b(x_n). \quad (\text{A.9})$$

Es importante señalar que los términos aleatorios en el ruido se obtienen a partir de una distribución gaussiana.

A.2. Código en Matlab

```

1 close all
2 clear all
3 nruns=1000000
4 ti=0;
5 ton=1;
6 a=[1/0.65,1/0.8];
7 la=length(a);
8 g=gpuDevice(1);
9 reset(g)
10 hfigure;
11 nombre='activeharmonic_1_mo';
12 for j=1:la;
13     aj= a(j);
14     dt=1/1000.*aj;
15     ntimes=2*round((ton-ti)/dt);
16     t0=zeros(1,nruns);
17     x0=zeros(1,nruns);

```

```

18  tg=gpuArray(t0);
19  xg=gpuArray(x0);
20  tic
21  Nh=1000;
22  for ll=1:ntimes;
23      disp(num2str(aj) ':' num2str(j) ':')
24      [tg,xg]=arrayfun
25      xh=gather(xg);
26      indp=find(xn>1);
27      xg(indp)=1;
28      indn=find(xn<-1);
29      xg(indn)=-1;
30      xn=gather(xg);
31      [nelementsx, centersx]=hist(xn,Nh);
32      rho=nelementsx
33      maxprob(j,ll)=rho(round(Nh/2));
34  end
35
36  figure(1)
37  plot(centersx,rho,'-','color',rand(1,3));hold on;
38  drawnow
39
40  toc
41  saveas(h,[nombre '_a' num2str(aj) '_b' num2str(bj) '.fig'])
42  save([nombre '_a' num2str(aj) '_b' num2str(bj) '.mat'], 'rho'
      , 'centersx', 'maxprob', 'xn');
43 end

1 function [tf,x]=
      double_well_brownian_activeharmonicdiffusion1p_adim_gpu(ti,
      dt,a,b,x)
2 Nsub=1;
3 tf=ti+dt;
4 deltat=dt/Nsub;
5 z=a^(1/3)/(1+sqrt(1-a^2))^(1/3)+(1+sqrt(1-a^2))^(1/3)/a^(1/3);
6 D=(9/4)*a*(b*z)^(-1)*(1-(9/4)*a^2*z^2*x.^2.*(1-(1/3).*z^2*x.^2)
      ^2);
7 Enx=(deltat*D).^(1/2).*randn();
8 F1=(3/2)*a*z*x.*(1-(1/3)*z^2*x.^2);
9
10 x=x+F1.*deltat+Enx;

```


Bibliografía

- [1] I. Buttinoni, G. Volpe F. Kümmel G. Volpe and Clemens Bechinger. Active brownian motion tunable by light. *J. Phys. Condens. Matter*, 24(284129), 2012.
- [2] W. T. Coffey J. T. Waldron, Yu. P. Kalmykov. *The Langevin Equation*, volume 14. Word Scientific Series.
- [3] F. Schweitzer. *Brownian agents and active particles*. Springer, 2003.
- [4] H. C. Berg. *E. Coli in Motion*. Springer-Verlag New York, Inc., 2004.
- [5] M. T. Mardigan. *Brock: Biology of the microorganisms*. Pearson, 2015.
- [6] R. Golestanian T. R. Liverpool, A. Ajdari. Propulsion of a Molecular Machine by Asymmetric Distribution of Reaction Products. *Phys. Rev. Lett.*, 94(220801):1–4.
- [7] J. Palacci, C. Cottin-Bizanne C. Ybert L. Bocquet. Sedimentation and effective temperature of active colloidal suspensions. *Phys. Rev. Lett.*, 105(088304):1, 2010.
- [8] Xiao-lun Wu and A. Libchaber. Particle diffusion in a quasi-two-dimensional bacterial bath. *Phys. Rev. E*, 84(13):3017–3020, 2000.
- [9] Étienne Fodor, Cesare Nardini, Michael E Cates, Julien Tailleur, Paolo Visco, and Frédéric Van Wijland. How far from equilibrium is active matter? *Phys. Rev. Lett.*, 117(038103):1–6, 2016.
- [10] M. Enculescu and H. Stark. Active Colloidal Suspensions Exhibit Polar Order under Gravity. *Phys. Rev. Lett.*, 107(058301):1–4, 2011.
- [11] Eyal Ben-isaac, Yongkeun Park, Gabriel Popescu, Frank L. H. Brown, Nir S. Gov, and Yair Shokef. Effective temperature of red-blood-cell membrane fluctuations. *Phys. Rev. Lett.*, 106(238103):1–4.

- [12] Davide Loi, Stefano Mossa, and Leticia F. Cugliandolo. Effective temperature of active matter. *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 77(5):3726–3729, 2008.
- [13] J. Tailleur and M. E. Cates. Sedimentation, trapping, and rectification of dilute bacteria. *Europhysics Letters*, 86(60002), 2009.
- [14] G. Szamel. Self-propelled particle in an external potential : Existence of an effective temperature. *Phys. Rev. E*, 90(012111):1–7, 2014.
- [15] R. Brown. A brief account of microscopical observations... on the particles contained in the pollen of plants; and on the general existence of active molecules in organic and inorganic bodies. *Edinburg New Philosophical Journal*, pages 358–371, 1828.
- [16] C. Wiener. *Poggendorffs Annalen*, 118:79, 1863.
- [17] M. Gouy. Note sur le mouvement brownien. *Journal de Physique Théorique et Appliquée*, 7(1):561–564, 1888.
- [18] A. Einstein. Über die von der molekularkinetischen theorie der wärme geforderte bewegung von in ruhenden flüssigkeiten suspendierten teilchen. *Annalen der Physik*, 322(8):549–560, 1905.
- [19] M. von Smoluchowski. Zur kinetischen Theorie der Brownschen Molekularbewegung und der Suspensionen. *Annalen der Physik*, 326(14):756–780, 1906.
- [20] J. Perrin. *Brownian Movement and Molecular Reality*. Dover Publications, 1995.
- [21] P. Langevin. Sur la théorie du mouvement brownien. *Comptes Rendus Hebdomadaires des Séances de L'Academie des Sciences*, 146:530, 1908.
- [22] E. Nelson. *Dynamical Theories of Brownian Motion*, volume 131. Princeton University Press, 1967.
- [23] B. B. Mandelbrot. *The Fractal Geometry Of Nature*. W. H. Freeman, New York, 1983.
- [24] J. Tailleur and M. E. Cates. Statistical Mechanics of Interacting Run-and-Tumble Bacteria. *Phys. Rev. Lett.*, 100(218103):3, 2008.
- [25] L. Arnold. *Stochastic Differential Equations: Theory and Applications*. Wiley, 1992.

- [26] H. Risken. *The Fokker-Planck Equation: Methods of Solution and Applications*. Springer, 1996.
- [27] R. Kubo N. Hashitsume, M. Toda. *Statistical Physics II: Nonequilibrium Statistical Mechanics*. 1991.
- [28] Kubo. The fluctuation-dissipation theorem. *Reports on Progress in Physics*, 29(1):306, 1966.
- [29] Ilya Prigogine and Dilip Kondepui. *Modern Thermodynamics*. 1998.
- [30] Ilya Prigogine. Le domaine de validité de la thermodynamique des phénomènes irréversibles. *Physica*, 15(1-2):272–284, 1949.
- [31] N.G. van Kampen. Relative stability in nonuniform temperature. *IBM Journal of Research and Development*, 32(1):107–111, 1988.
- [32] N.G. van Kampen. *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*. Elsevier, 2007.
- [33] Xavier Durang, Chulan Kwon, and Hyunggyu Park. Overdamped limit and inverse-friction expansion for Brownian motion in an inhomogeneous medium. 062118:1–6, 2015.
- [34] M. Matsuo and S.-i. Sasa. Stochastic Energetics of Non-uniform Temperature Systems. *Physica*, A 276:188, 2000.
- [35] K Sekimoto. Temporal coarse graining for systems of brownian particles with non-constant temperature. *J. Phys. Soc. Japan*, 68:1448, 1999.
- [36] P. Romanczuk, W. Ebeling, and B. Lindner. Active brownian particles. *Eur. Phys. J.*, 162:1, 2012.
- [37] Frank Schweitzer, Werner Ebeling, and Benno Tilch. Complex motion of brownian particles with energy depots. *Phys. Rev. Lett.*, 80(23):5044–5047, 1998.
- [38] U. Erdmann, W. Ebeling, and F Schweitzer. Brownian particles far from equilibrium. *Eur. Phys. J.*, B 15:105–113, 2000.
- [39] M. Schienbein and H. Gruler. Langevin equation, fokker-planck equation and cell migration. *Bull. Math. Biol.*, 55(3):585, 1993.
- [40] R. Fürth. Die Brownsche Bewegung bei Berücksichtigung einer Persistenz der Bewegungsrichtung. Mit Anwendungen auf die Bewegung lebender Infusorien. *Zeitschrift für Physik*, 2(3):244–256, 1920.

- [41] G. I. Taylor. Diffusion by continuous movements. *Proceedings of the London Mathematical Society*, s2-20(1):196–212, 1921.
- [42] S. Goldstein. On diffusion by discontinuous movements, and on the telegraph equation. *Q. J. Appl. Math.*, 4(2):139, 1951.
- [43] J. Masoliver and G. H. Weiss. Telegrapher’s equations with variable propagation speeds. *Phys. Rev. E*, 49(5):48, 1994.
- [44] M. J. Schnitzer. Theory of continuum random walks and application to chemotaxis. *Phys. Rev. E*, 48(4):2553, 1993.
- [45] I. Santamaría-Holek and A. Pérez-Madrid. Mean-field «temperature» in far from equilibrium systems. *J. Chem. Phys.*, 115:9439, 2011.
- [46] Raf De Dier, J. Vermant, J. F. Brady, and S. C. Takatori. Acoustic trapping of active matter. *Nature Communications*, 7:1–7, 2016.
- [47] O. Miramontes, O. Desouza, A. Paiva, L. R. Marins, and S. Orozco. Levy flights and self-similar exploratory behaviour of termite workers : beyond model fitting,. *PloS One*, 9(111183):1, 2014.
- [48] Y. Fily, A. Baskaran, and M. F. Hagan. Soft Matter confinement. 1:5609–5617, 2014.
- [49] M. E. Solon, A. P. Cates and J. Tailleur. Active brownian particles and run-and-tumble particles : A comparative study. *Eur. Phys. J. Special Topics*, 224:1231–1262, 2015.
- [50] C. Gardiner. *Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry, and the Natural Sciences*. Springer-Verlag, 2004.
- [51] E. Roldán. *Irreversibility and dissipation in microscopic systems*. Springer Theses, 2014.