



90362
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

**MOTORES BROWNIANOS EN UNA
Y DOS DIMENSIONES SUJETOS A
UNA FUERZA EXTERNA ALEATORIA**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:

ERNESTO GONZÁLEZ CANDELA

DIRECTOR DE TESIS: **DR. VICTOR MANUEL ROMERO ROCHIN**



posgrado en ciencias físicas
u n a m

MÉXICO, D.F.

2005

m. 352166



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Autorizo a la Dirección General de Bibliotecas de la UNAM a difundir en formato electrónico e impreso el contenido de mi trabajo recepcional.

NOMBRE: Ernesto González Candela

FECHA: 25 - Nov - 2005

FIRMA: 

MOTORES BROWNIANOS EN UNA Y DOS DIMENSIONES SUJETOS A UNA FUERZA EXTERNA ALEATORIA

Ernesto González Candela

Noviembre 2005

...a mis padres y hermanos.

Agradecimientos

Víctor Romero Rochín, que en primera instancia se arriesgó a dirigirme la tesis dadas las no muy ortodoxas circunstancias. Por su paciencia, comprensión, inteligencia, amistad, y sobre todo por su infinito entusiasmo, que me motivó durante todo el proceso.

Los sinodales, Laura Viana, José Luis Mateos, Raúl Rechtman, Ramón Peralta, Carlos Málaga e Iván Santamaría Holek por haber leído este trabajo, por sus correcciones y comentarios que ayudaron a mejorar y a hacer más completo este trabajo.

Los amigos, en particular Iván, Paco, Carlos y Patrick, quienes estuvieron presentes durante todo el proceso con su apoyo y enseñanzas, tanto en cuestiones operativas (FORTRAN, bash, Latex, Matlab, etc.) como en cuestiones teóricas. Su apoyo fue esencial.

La gente del Banco de México, Enrique Guarner, Eduardo González y Alberto Torfer por el apoyo y el estímulo necesarios para llevar a cabo esta tesis. La oficina de Ingeniería de Proyectos por comprenderme, soportarme y escucharme, y en particular a Cruz y a Benjamin por su ayuda con las figuras.

A todos, muchas gracias.

Resumen

En este trabajo se estudia un modelo de motores brownianos para los procesos de transporte intracelular de proteínas motoras sobre microtúbulos.

El modelo consiste en una partícula browniana sobreamortiguada, en un baño térmico (ruido blanco), sujeta a una fuerza conservativa debida a un potencial periódico asimétrico y a una fuerza externa aleatoria correlacionada (ruido de color).

El modelo se estudia en una y dos dimensiones. Para el caso de una dimensión se emplea un potencial tipo matraca (ratchet potential en inglés) y se plantea la ecuación de Langevin que describe el movimiento de la partícula browniana. Partiendo de ésta, se deduce la correspondiente ecuación de Fokker-Planck, de la cual se obtienen las condiciones necesarias para la presencia de transporte dirigido, es decir, corriente. De dicha ecuación también se obtienen las ecuaciones de evolución de los promedios de las cantidades más relevantes del problema. Ante la falta de una solución analítica de la ecuación de Langevin, se procede a resolverla numéricamente. El método numérico está basado en una integración estocástica usando la fórmula de Euler. Los resultados coinciden con las predicciones derivadas de la ecuación de Fokker-Planck y, en particular, cuando se tiene un potencial tipo matraca y una fuerza externa aleatoria correlacionada se observa la presencia de una corriente constante.

Para modelar las fuerzas involucradas en la interacción entre proteínas motoras y microtúbulos en dos dimensiones, se propone un novedoso potencial en forma de “canal” o “filamento atractivo”, en cuyo fondo contiene una estructura periódica asimétrica longitudinal. Se plantean las ecuaciones de Langevin correspondientes y se resuelven numéricamente utilizando el mismo método que en el caso de una dimensión generalizado a dos dimensiones. Se analizan los resultados desde diversos puntos de vista y se encuentra que el movimiento de la partícula browniana reproduce cualitativamente parte del comportamiento observado experimentalmente.

Abstract

In this work, a Brownian motor model for the intracellular transport of motor proteins on microtubules, is studied.

The model consists of an overdamped Brownian particle in a thermal bath (white noise), subject to a conservative force due to an asymmetric periodic potential and to an unbiased random external force (colored noise).

The model is studied in one and two dimensions. For the one-dimensional case, a ratchet potential is used and the Langevin equations that describe the motion of the Brownian particle are formulated. From this formulation, the Fokker-Planck equation is derived. Based on it, the necessary conditions for the generation of directed transport (current), are deduced, together with the governing equations of the averages for the most relevant quantities. The Langevin equation is solved numerically due to the lack of an analytic solution. The numerical method is based on a stochastic integration using the Euler formula. The results match those predictions obtained from the Fokker-Planck equation, in particular, when a ratchet potential and an unbiased random external force are present, a constant current is observed.

In order to model the forces of interaction between the motor proteins and the microtubules in two dimensions, a new potential is proposed, whose shape resembles a long attractive filament (or channel) with a periodic and asymmetric structure inside, on the longitudinal direction. The corresponding Langevin equations are formulated. These are solved numerically using the Euler method generalized for multi-dimensions. The results are analyzed from several points of view and it is found that the motion of the Brownian particle resembles qualitatively that observed in experiments with motor proteins and microtubules.

Contenido

1	Introducción	1
2	Proteínas motoras	9
1	Transporte intracelular	9
2	Motores brownianos como modelo del transporte en las células	12
3	Motores brownianos en una dimensión	15
1	Movimiento browniano	15
2	Ecuación de Langevin	17
3	Ecuación de Langevin en presencia de fuerzas conservativas	21
3.1	Régimen sobreamortiguado	21
3.2	Potencial tipo matraca	21
3.3	Fuerza externa aleatoria	22
4	Ecuación de Fokker-Planck	24
5	El estado estacionario	28
6	Ecuaciones de evolución de los promedios	30
7	Existencia de corriente	31
8	Solución numérica de la ecuación de Langevin	33
8.1	Método numérico	34
8.2	Resultados y su análisis	38
9	Análisis comparativo de resultados numéricos	47
9.1	Comparación con ecuaciones de evolución	47
9.2	Análisis de la fuerza del potencial tipo matraca	49
10	Conclusiones	50

4	Modelo bidimensional de una proteína motora sobre un filamento	53
1	El modelo de filamento	53
2	Potencial filamento	54
3	Ecuación de Langevin en dos dimensiones	56
4	Solución numérica	57
4.1	Método numérico	58
4.2	Discretización y adimensionalización	58
4.3	Parámetros	60
5	Resultados de la solución numérica y su análisis	61
5.1	Partícula libre	61
5.2	Partícula libre con fuerza externa dependiente del tiempo	62
5.3	Partícula con fuerza externa dependiente del tiempo y potencial filamento	63
5.4	Difusión	64
5.5	Corriente	66
5.6	Probabilidad de permanencia	67
5.7	Tiempos de residencia	69
5.8	Distribución de probabilidad	71
6	Conclusiones	73
5	Conclusiones generales y perspectivas	77
1	Conclusiones generales	77
2	Perspectivas	80
A	Detalles de la deducción de la ecuación de Fokker-Planck	83
B	Código del programa en una dimensión	89
C	Código del programa en dos dimensiones	97
D	Generador de números pseudo-aleatorios	107

Capítulo 1

Introducción

De unos años a la fecha ha surgido un creciente interés interdisciplinario en el estudio de los procesos biológicos en paralelo con la realización de experimentos que, gracias a los avances tecnológicos, han permitido que dichos procesos biológicos sean descritos con mayor detalle. Ambos hechos en conjunto han permitido la aplicación de principios y técnicas de la física para intentar comprenderlos y explicarlos. Entre los procesos biológicos que han despertado interés en los últimos años, se encuentran los fenómenos de transporte dentro de la célula, que se llevan a cabo por medio de proteínas y enzimas llamadas *motores moleculares*. Dichos motores moleculares son los responsables de llevar diversas sustancias químicas, empaquetadas en organelos conocidos como vesículas, de un sitio a otro de la célula con mucho mayor eficiencia que la lograda mediante la difusión [1]. Para realizar la función de transporte, los motores moleculares consumen energía química, que obtienen del medio que los rodea, y la transforman en movimiento mecánico. Sus dimensiones son tales que su dinámica es dominada por las incesantes colisiones de las moléculas del fluido en el que se encuentran contenidas, llamado citoplasma, es decir, se encuentran en el régimen browniano.

Uno de los modelos biofísicos que se han propuesto para los motores moleculares consiste en considerarlos, de manera minimalista, como simples partículas brownianas fuera de equilibrio bajo la influencia de un potencial periódico asimétrico. A los modelos con estas características se les conoce como *motores brownianos* o como *matracas estocásticas* del inglés *stochastic ratchets*.

El presente trabajo está enfocado al estudio de este tipo de fenómenos de transporte en sistemas periódicos asimétricos fuera de equilibrio térmico, en los cuales el ruido térmico, proveniente del medio en que se encuentran contenidos, juega un papel dominante. Como

una consecuencia inevitable, la dinámica del sistema está siempre sujeta a efectos disipativos. Así, el transporte dirigido en un sistema periódico, en contacto con un baño térmico que genera ruido y disipa energía por medio de la fricción, está necesariamente gobernado por la Segunda Ley de la Termodinámica. El sistema tiene entonces que ser sacado del equilibrio térmico por una perturbación externa dependiente del tiempo, ya sea ésta determinista o estocástica, para poder así obtener un trabajo neto, representado por el transporte dirigido. De la enorme cantidad de opciones para llevar a cabo esta tarea en el presente trabajo se eligió como perturbación externa un proceso estocástico, dependiente del tiempo y correlacionado, es decir, un *ruido de color*.

Además de estar fuera de equilibrio térmico, un requerimiento indispensable para el surgimiento del transporte dirigido en sistemas con periodicidad espacial es el rompimiento de la simetría espacial. La típica manera de lograr esto, y que será la empleada en el presente trabajo, es a través de un potencial periódico asimétrico conocido como *potencial tipo matraca*, gracias a un dispositivo ideado por Feynman que se describe más adelante.

El progreso en el campo de los motores brownianos ha evolucionado a través de contribuciones de muy diversa índole sobre los principios básicos en diferentes contextos. Smoluchowski [2] fue el primero en hablar explícitamente de la ausencia de transporte en sistemas periódicos asimétricos en contacto con un baño térmico simple. Mostró, mediante un experimento pensado (“Gedankenexperiment”) sobre fluctuaciones microscópicas, la imposibilidad de convertir movimiento browniano en trabajo útil. El siguiente paso importante se debe a Feynman [3], con la recapitulación y extensión del problema mediante un dispositivo para ejemplificar la Segunda Ley de la Termodinámica.

Dicho dispositivo cuenta entre sus partes con una rueda dentada con dientes asimétricos y un trinquete (ver Figura 1.1). El trinquete cuenta con un resorte que lo regresa a su posición una vez que la rueda gira y lo levanta. Este mecanismo permite a la rueda girar en la dirección de las manecillas del reloj, pero, debido a la presencia del trinquete, impide que gire en la dirección contraria. Este mecanismo es conocido como matraca.

El dispositivo completo ideado por Feynman está constituido por dos cajas, cada una de las cuales que contiene un gas. Una de las cajas encierra a la matraca y se encuentra a una temperatura T_1 . La otra caja contiene un sistema de aspas y está a una temperatura T_2 . El sistema de aspas y la rueda se encuentran unidas por un eje, como se muestra en la Figura 1.1. Se hace la suposición de que el dispositivo es de dimensiones microscópicas,

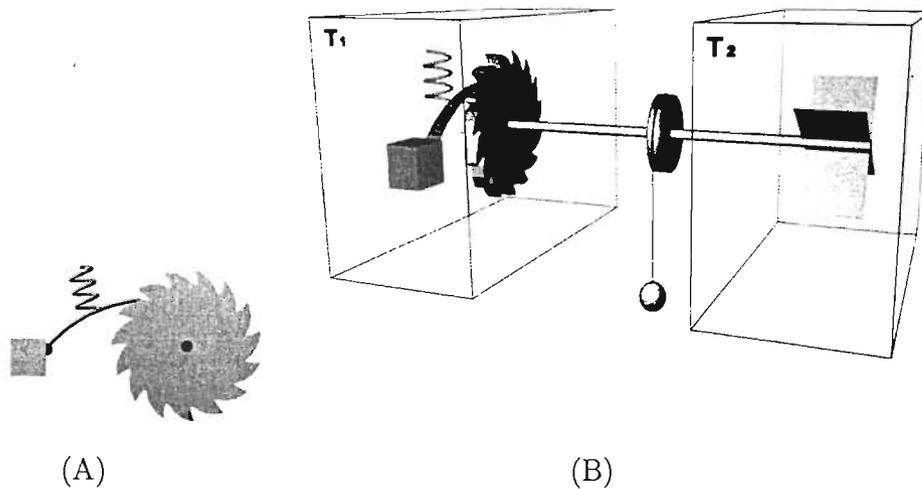


Figura 1.1: Dispositivo de Feynman. (A) Matraca.- Rueda dentada con un trinquete que permite que la rueda gire en la dirección de las manecillas del reloj, pero impide que gire en la dirección contraria. (B) Dispositivo completo.- Matraca conectada mediante un eje a unas aspas y a una polea que soporta un peso. En ausencia del trinquete y el peso, las colisiones aleatorias del gas sobre las aspas causan un movimiento rotatorio descorrelacionado en la rueda. El trinquete supuestamente rectifica dicho movimiento y levanta el peso.

tales que la dinámica de sus partes está sujeta a las fluctuaciones térmicas aleatorias, es decir, se encuentra en el régimen browniano. Por tal motivo, este dispositivo es conocido como *matraca estocástica* y es el que le da nombre a este tipo de sistemas periódicos sujetos a movimiento browniano. Asimismo, a los potenciales con una estructura periódica asimétrica, como los dientes de la matraca, se les llama potenciales tipo matraca.

De primera instancia parece convincente pensar que la rueda gire en la dirección de las manecillas del reloj por efecto de las colisiones de las moléculas de gas de la segunda caja sobre las aspas, en combinación con el mecanismo de la matraca. De manera que si un pequeño peso es colgado en una polea sujeta al eje, como se observa en la Figura 1.1, este podría ser levantado, realizándose así un trabajo.

Sin embargo, si las cajas se encuentran a la misma temperatura, $T_1 = T_2$, esta suposición es incorrecta. A pesar del mecanismo asimétrico, no es posible que se presente movimiento en una dirección preferencial. De otra manera el dispositivo representaría una máquina de movimiento perpetuo de segundo tipo, en contradicción con la Segunda Ley de

la Termodinámica. Dadas las dimensiones microscópicas del dispositivo completo, tanto las aspas como la rueda y el trinquete están expuestos a las colisiones aleatorias de las moléculas de los respectivos gases. Esto hace que las aspas muevan el eje y este a su vez mueva la rueda. Sin embargo el trinquete, debido al mismo origen, también tiene un movimiento fluctuante en su único grado de libertad, hacia arriba y abajo, independiente a la rueda. De modo que de vez en cuando el trinquete se levanta y permite que la rueda gire libremente, en particular en sentido contrario a las manecillas del reloj. Feynman demostró que, mientras las dos cajas estén a la misma temperatura habrá un balance probabilístico, cuya consecuencia es que la rueda gire en ambas direcciones con la misma probabilidad y el trabajo neto será cero.

La única manera de obtener trabajo de este sistema es manteniendo a la caja que contiene las aspas a una temperatura mayor que la de la caja con la matraca, es decir, $T_2 > T_1$. Logrando con esto que la probabilidad de que la rueda gire por efecto de las aspas sea mayor a la probabilidad de que el trinquete se levante. Sin embargo, para que esto suceda se requiere de una fuente de energía que mantenga esta diferencia de temperatura. Es decir, que se requiere de ejercer un trabajo sobre el sistema.

Una parte importante en el desarrollo de la teoría de los modelos de motores brownianos corresponde a la investigación sobre transporte intracelular, específicamente a la bioquímica de los motores moleculares debido a que, como se ha mencionado antes, estos sistemas han sido utilizados como modelos de proteínas motoras.

De la enorme cantidad de trabajos relacionados con estos sistemas se pueden mencionar las refs.[4–11]. Entre estos destaca el trabajo de Magnasco [4], quien fue uno de los primeros en utilizar este tipo de modelos para transporte intracelular y que señaló que los motores brownianos tienen la capacidad de “rectificar” ruido correlacionado simétrico, siendo entonces capaces de producir una corriente neta. Este resultado verificado posteriormente en los trabajos de las refs.[5,6] y en muchos otros trabajos más recientes. Desde entonces este tipo de modelos han sido aplicados a una gran variedad de campos del conocimiento, como: la misma física, la biología, la economía, entre otros [12,13].

Uno de los aspectos más interesantes de este problema es el hecho de comprender cómo la aplicación de una fuerza externa simétrica y de promedio cero, en un sistema donde las fluctuaciones térmicas del medio son también simétricas, sea capaz de producir una corriente neta unidireccional. El problema se ha analizado siguiendo diferentes enfoques,

poniendo en claro cuáles son las condiciones necesarias para que el fenómeno de transporte se presente. Sin embargo, no obstante la gran cantidad de trabajos al respecto, la esencia del problema y los motivos básicos del porqué el fenómeno se presenta, no están bien comprendidos aún. Predecir la dirección del transporte y la magnitud de la corriente generada siguen siendo problemas no resueltos completamente. Una vez que las condiciones necesarias para la aparición de la corriente están dadas, encontrar los valores de los parámetros involucrados para observar una corriente de cierto valor es un asunto de prueba y error. Más aún, existen casos en los que la dirección de la corriente cambia al variar los valores de los parámetros del sistema. A este comportamiento se le conoce como inversión de corriente y no son bien comprendidas aún las razones por las cuales ocurre. Sin embargo, en el caso determinista, existen trabajos que explican el fenómeno [14].

El primer objetivo de este trabajo es contribuir a la comprensión de los mecanismos elementales que controlan el comportamiento del sistema. Esto se lleva a cabo mediante un análisis tanto teórico como numérico en una dimensión.

El segundo objetivo de este trabajo es introducir un nuevo modelo para las proteínas motoras en dos dimensiones. El modelo consiste en un filamento atractivo recto que en su interior consta de una estructura periódica y asimétrica.

El trabajo está organizado de la siguiente manera. En el Capítulo 2 se presenta una descripción de las proteínas motoras y del mecanismo mediante el cual “caminan” para transportar vesículas dentro de las células. Asimismo, se plantea la relación entre la realidad biológica de las proteínas motoras y el modelo de motores brownianos propuesto.

En este modelo se ha considerado a la proteína motora como una partícula browniana inmersa en un baño térmico debido a lo cual se encuentra sometida a la acción de fuerzas estocásticas producidas por las colisiones de las moléculas del baño térmico que la rodea. Adicionalmente, se incluye la acción de un potencial periódico asimétrico que modela, de manera simplificada, la compleja interacción entre la proteína motora y la estructura sobre la cual se desplaza. Finalmente, se considera un término de fuerza externa, aleatoria, no conservativa y dependiente del tiempo, que simula el proceso mediante el cual la proteína motora toma energía del medio para transformarla en energía mecánica.

En el Capítulo 3 se establecen las bases del movimiento browniano y se plantea la ecuación de Langevin para el caso en el que se tiene una fuerza externa aleatoria correlacionada, y un potencial asimétrico tipo matraca. Se deduce después la ecuación de

Fokker-Planck correspondiente al problema, se discuten algunos resultados derivados de su análisis y se obtienen las ecuaciones de evolución de los promedios de las cantidades más relevantes del problema. Por otra parte, se resuelve numéricamente la ecuación de Langevin calculando en el proceso los promedios de las cantidades antes mencionadas. Se concluye el capítulo con un análisis comparativo entre los resultados numéricos y las ecuaciones de evolución obtenidas a partir de la ecuación de Fokker-Planck.

En este mismo capítulo se encuentran, tanto de los resultados analíticos de la ecuación de Fokker-Planck como del análisis numérico de la ecuación de Langevin, las condiciones necesarias para que en el modelo se produzca corriente. Se demuestra que si el sistema llega a un estado estacionario la corriente se anula. Se demuestra también que uno de los ingredientes esenciales para que exista una corriente es el hecho de que la fuerza externa aleatoria que se añade esté correlacionada. En las condiciones adecuadas, aparece una corriente cuya magnitud es depende de los parámetros adimensionales del sistema. En particular, se encuentra que la corriente no desaparece cuando la temperatura del baño térmico tiende a cero. En ningún caso se presenta inversión de corriente. Se llega a una expresión en la que se demuestra que la corriente está determinada por el promedio de la fuerza debida al potencial. Este resultado es verificado numéricamente. En todos los casos se encuentra una concordancia entre los resultados numéricos y los analíticos, corroborando así la equivalencia entre la ecuación de Langevin y la ecuación de Fokker-Planck hallada. Con esto último se verifica la validez de la discretización aplicada para el análisis numérico.

En el Capítulo 4 se presenta un modelo bidimensional de filamento para el transporte que llevan a cabo las proteínas motoras dentro de la célula, diferente a los modelos bidimensionales que se han ensayado previamente en este tipo de sistemas [15–20]. Dicho modelo consiste en una partícula en un espacio de dos dimensiones sujeta a las mismas fuerzas que en el caso en una dimensión, pero en este caso bajo la influencia de un potencial atractivo en forma de filamento recto a lo largo del eje x . El filamento contiene en su interior una estructura periódica y asimétrica. A continuación, se plantean las ecuaciones diferenciales correspondientes y se presenta un análisis detallado de los resultados obtenidos tras resolver numéricamente dichas ecuaciones. En particular, se estudian la corriente y las probabilidades de tiempos de residencia de la partícula, tanto en el estado ligado como en el estado desligado del filamento. También se estudia la probabilidad de permanencia dentro del filamento, así como la evolución temporal de la distribución de probabilidad. Se encuentra,

entre otras cosas, que la presencia del filamento ejerce una influencia sobre la partícula tal que su movimiento se ve afectado, presentando un desplazamiento promedio distinto de cero, es decir, corriente. Se concluye que este modelo de filamento resulta adecuado para los procesos de transporte que llevan a cabo las proteínas motoras llamadas *kinesinas* sobre los microtúbulos, ya que reproduce cualitativamente parte del comportamiento observado experimentalmente.

Finalmente, en el Capítulo 5 se presentan las conclusiones generales del trabajo, así como las perspectivas para trabajos posteriores.

Capítulo 2

Proteínas motoras

1 Transporte intracelular

Las células más primitivas son las llamadas células procariontes, células sin núcleo, principalmente bacterias. Su interior consiste básicamente en una gran sopa sin particiones o divisiones internas. Debido a que las células procariontes son además relativamente pequeñas, el transporte intracelular de las diversas sustancias puede llevarse a cabo sin problemas mediante la difusión térmica. Es decir, la difusión resulta suficiente para que estas sustancias lleguen a tiempo a las diferentes regiones de la célula donde son requeridas, de manera que el metabolismo de la célula sea el adecuado. En contraste, las células eucariontes, constituyentes de todo organismo multicelular, no son sólo más complejas y sofisticadas que las procariontes, sino que son considerablemente más grandes (más de un orden de magnitud). En este caso el transporte mediante la difusión térmica resulta insuficiente, ya que un incremento de 20 veces en el tamaño de la célula implica un metabolismo 400 veces más lento [4]. Entre los elementos distintivos de las células eucariontes se encuentran: el núcleo, muchos otros compartimientos internos llamados organelos, y una red de filamentos poliméricos -*el citoesqueleto*- que los organiza, interconecta y da soporte estructural a la célula [1].

Algunos de estos filamentos poliméricos son fibras de proteínas, llamadas *microtúbulos*. Los microtúbulos están constituidos por moléculas de *tubulina*, cada una de las cuales es un dímero que consiste de dos proteínas globulares relacionadas entre sí llamadas α -tubulina y β -tubulina. Cada dímero de tubulina tiene aproximadamente $4nm$ de diámetro y $8nm$ de longitud. Las tubulinas se enlazan formando cadenas lineales de tal manera que las proteínas α -tubulina y β -tubulina se encuentran dispuestas alternadamente (ver Figura

2.1). Estas cadenas se conocen como *protofilamentos*. Un microtúbulo está compuesto típicamente de 13 protofilamentos dispuestos uno junto al otro en paralelo formando un tubo hueco [1], como se muestra en la Figura 2.1. La asimetría de los dímeros de tubulina

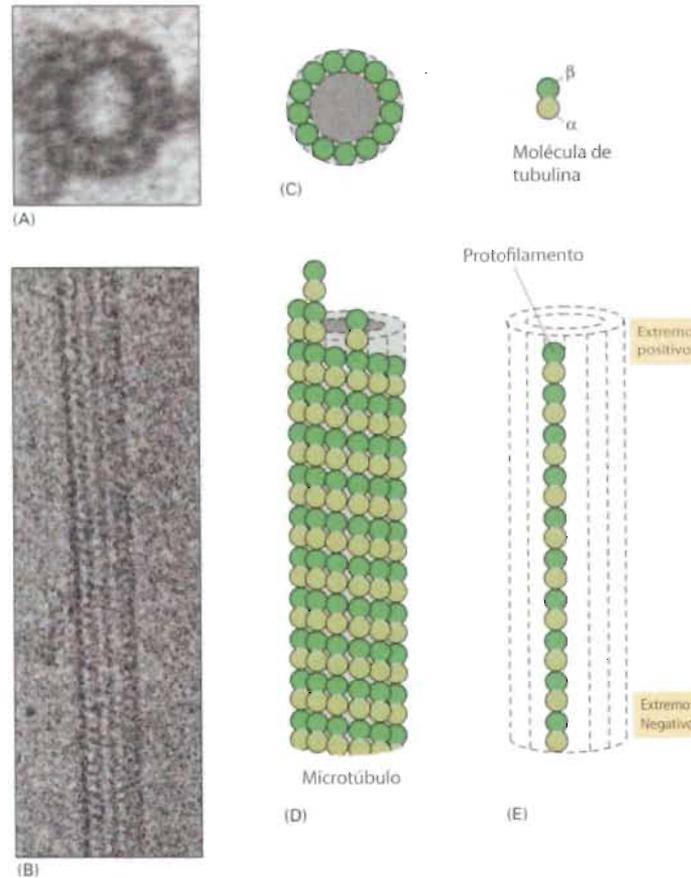


Figura 2.1: (A) Corte transversal de un microtúbulo, imagen obtenida mediante microscopía electrónica. (B) Imagen de un segmento de microtúbulo, obtenida mediante la misma técnica. (C) Esquema del corte transversal de un microtúbulo donde, al igual que en la imagen, se muestra como el microtúbulo está formado por 13 protofilamentos. (D) Protofilamentos alineados en paralelo formando un tubo hueco, el microtúbulo. (E) Esquema de molécula de tubulina y protofilamento. Este último consiste en una cadena de moléculas de tubulina con la misma orientación. Esta figura ha sido adaptada de la ref.[1].

y el hecho de que cada protofilamento tiene en sus extremos una tubulina α y una β , respectivamente, tiene como consecuencia que el microtúbulo tenga una polaridad distinta de cero. Adicionalmente, el tubo exhibe una estructura helicoidal ya que cada uno de los protofilamentos está ligeramente desfasado respecto a sus vecinos (ver Figura 2.1). El

microtúbulo tiene un diámetro externo de aproximadamente $25nm$ y una longitud total de hasta algunas μm . Debido a la polaridad de cada uno de los filamentos, el microtúbulo tiene también polaridad, un extremo positivo y uno negativo [1].

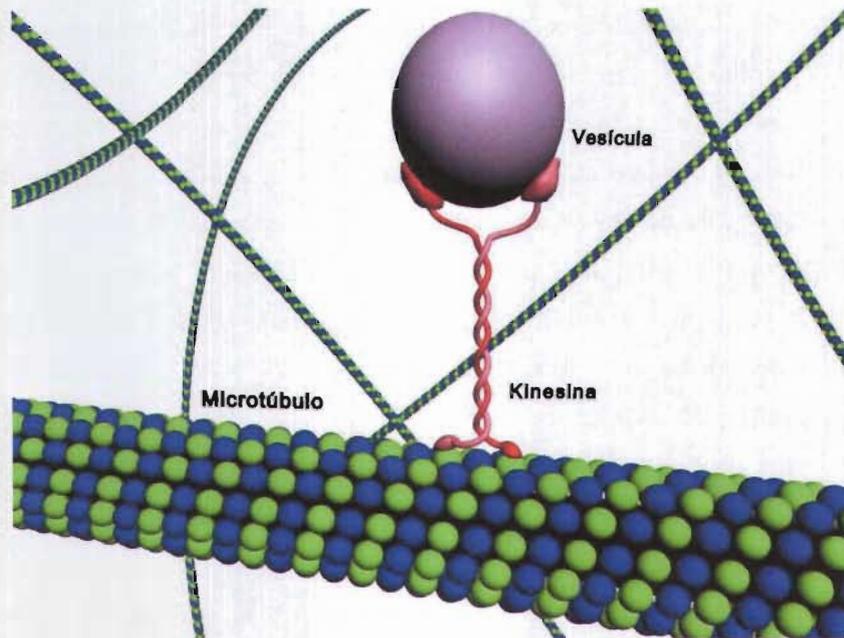


Figura 2.2: Esquema de kinesina transportando una vesícula a lo largo de un microtúbulo.

Entre otras funciones, los microtúbulos son utilizados como “autopistas” a lo largo de los cuales los nutrientes, desechos, etc. son transportados en *vesículas* por proteínas motoras específicas. En conjunto actúan como un sistema circulatorio y alimentan a las distintas regiones de la célula [12]. Se ha observado que las proteínas motoras *kinesina* y *dineína* hidrolizan ATP (trifosfato de adenosina) para “caminar” y desplazar vesículas a lo largo de los microtúbulos liberando ADP (difosfato de adenosina) y una molécula de fosfato. En particular, la kinesina axonal (ver Figura 2.2) utiliza la energía de la hidrólisis del ATP para desplazar vesículas en pasos discretos de $8nm$, precisamente la longitud de una molécula de tubulina, a una velocidad de entre 0.5 y $2\mu m/s$ en la dirección de polaridad positiva del microtúbulo [15, 21]. Observaciones experimentales de kinesinas han mostrado que su “caminata” o desplazamiento sobre microtúbulos ocurre siguiendo una trayectoria recta a lo largo de uno de los protofilamentos [21]; este tipo de proteína no cambia de protofilamento mientras se desplaza, de modo que la estructura helicoidal del microtúbulo no juega un papel importante. Las trayectorias de las dineínas, en cambio, visitan frecuentemente

muchos protofilamentos. Este trabajo estará enfocado a las kinesinas [1].

Se ha observado que las proteínas motoras no hidrolizan ATP a un ritmo apreciable a menos que se encuentren ligadas a los microtúbulos, indicando la estrecha relación entre el ciclo químico y la interacción con los microtúbulos [12]. Así, el transporte dirigido de vesículas y la hidrólisis se dan cuando las proteínas motoras se encuentran ligadas a un microtúbulo. En estas condiciones se genera una asimetría espacial que tiene su origen en una combinación de la estructura de la tubulina con la ligadura entre las proteínas y el microtúbulo [12]. Las proteínas motoras permanecen ligadas a los microtúbulos por intervalos de tiempo limitados y pueden ser caracterizados mediante un “tiempo de residencia”, que es el tiempo promedio entre el estado ligado y el no-ligado o libre. Dentro de las proteínas motoras estudiadas, se ha encontrado en las refs.[22-24] que el tiempo de residencia es de algunos segundos. En escalas de tiempo grandes respecto al tiempo de residencia, los movimientos de las proteínas consisten en una combinación alternada de secuencias entre el estado ligado y el estado libre. Cuando dichos motores moleculares no se encuentran ligados a un microtúbulo su movimiento corresponde al de un caminante al azar, es decir, movimiento browniano simple [1] y sólo se transportan en una dirección preferencial cuando se encuentran sobre el microtúbulo. El modelo propuesto en este trabajo tratará de capturar este hecho.

2 Motores brownianos como modelo del transporte en las células

Las proteínas motoras descritas presentan ciertas características que es importante señalar: a) los procesos de transporte ocurren a temperatura constante y no en presencia de gradientes de temperatura; b) las dimensiones de las proteínas motoras son tales que las fluctuaciones térmicas son apreciables, es decir, se encuentran en el régimen browniano; c) las proteínas motoras se transportan a lo largo de estructuras lineales periódicas como lo son los protofilamentos de los microtúbulos; d) existe una asimetría espacial en el sitio en el que las proteínas motoras se ligan al microtúbulo; y e) la liberación de energía en la hidrólisis del ATP juega el papel de agente externo de suministro de energía mediante la cual las proteínas motoras son capaces de realizar trabajo mecánico.

Estas observaciones sugieren que los procesos de transporte como los descritos puedan ser modelados mediante mecanismos que involucran motores brownianos, donde la proteína

motora actúa como una partícula browniana inmersa en un baño térmico y en presencia de un potencial periódico asimétrico. Adicionalmente, la partícula browniana es sometida a la acción de una fuerza externa aleatoria que modela de la hidrólisis del ATP.

En este trabajo se ha considerado un modelo de motor browniano haciendo uso de la teoría de Langevin del movimiento browniano. La proteína motora es modelada como una partícula browniana inmersa en un baño térmico, debido a lo cual se encuentra sometida a la acción de fuerzas estocásticas producidas por las colisiones de las moléculas del baño térmico que la rodea. Estas colisiones también frenan a la partícula, haciendo las veces de fuerzas disipativas provenientes del mismo medio. En los sistemas biológicos a los que está enfocado este trabajo, el medio es muy viscoso y la masa de la proteína es tan pequeña que, en una muy buena aproximación, la inercia puede ser despreciada respecto al resto de las fuerzas involucradas en el sistema [12]. Por lo tanto, se ha considerado que la partícula browniana del modelo se encuentra en un régimen sobreamortiguado. Adicionalmente, se incluye la acción de un potencial periódico asimétrico que modela, de manera simplificada, la compleja interacción entre la proteína motora y la estructura sobre la cual se desplaza. Finalmente, se considera un término de fuerza externa no conservativa y dependiente del tiempo que simula el proceso de la hidrólisis del ATP. Para que esta fuerza externa ejerza su acción se requiere que una molécula de ATP, la cual se encuentra inmersa en el fluido intracelular y moviéndose como caminante al azar, se una a la proteína motora y así se lleve a cabo el ciclo de la hidrólisis. Debido a la aleatoriedad con la que este proceso ocurre, se ha modelado a la hidrólisis como un proceso estocástico con su propio tiempo de correlación e independiente de la fuerza estocástica térmica. Para ambas fuerzas estocásticas, la térmica y la externa, se supone que el promedio temporal es cero, evitando con esto que la dirección del movimiento se vea forzada de manera preferencial.

Existen algunos trabajos en los que se han propuesto modelos con características similares al que aquí se propone [9, 19, 25]. Se ha encontrado que, bajo ciertas condiciones, los elementos incorporados en estos modelos dan por resultado un transporte neto de la partícula browniana que representa el movimiento unidireccional de la proteína motora.

Capítulo 3

Motores brownianos en una dimensión

En este capítulo se establecen las bases del movimiento browniano, haciendo mención a algunos de los resultados más relevantes sobre este tema. Una vez establecidas las bases, se plantea la ecuación de Langevin para el caso en el que se tiene: una fuerza externa, aleatoria y correlacionada; una fuerza conservativa debida a un potencial asimétrico; además de la fuerza estocástica térmica descorrelacionada y su correspondiente fuerza de fricción. Después se plantea el problema desde un punto de vista alternativo, a través de la ecuación de Fokker-Planck que se deduce partiendo de la ecuación de Langevin. Se discuten algunos resultados del análisis de la ecuación de Fokker-Planck. De dicha ecuación se obtienen las ecuaciones de evolución de los promedios de las cantidades más relevantes del problema. Por otra parte, se resuelve numéricamente la ecuación de Langevin calculando en el proceso los promedios de las cantidades antes mencionadas y se presentan y discuten los resultados obtenidos. Se discuten las condiciones para que exista transporte en el sistema. Se concluye con un análisis comparativo entre los resultados numéricos y las ecuaciones de evolución obtenidas a partir de la ecuación de Fokker-Planck.

1 Movimiento browniano

El movimiento browniano fue estudiado sistemáticamente, por primera vez, por Robert Brown en 1828. Con ayuda de un microscopio, observó que partículas de polen de un tamaño del orden de algunas micras, se dispersaban en una solución mediante un movimiento fluctuante ininterrumpido e irregular. También reconoció que este movimiento no se debía a

causas biológicas, como se creía entonces, sino que tenía un origen físico. De hecho, encontró que este fenómeno era observable con partículas de cualquier material pero de tamaños comparables, ya fueran estos orgánicos o inorgánicos [26]. Muy pronto los movimientos fueron atribuidos a colisiones entre los componentes microscópicos de la materia. Einstein fue de los primeros en reconocer que el origen de estos movimientos es el bombardeo incesante y aleatorio de las moléculas del líquido sobre las partículas en cuestión [26]. En su artículo de 1905, ref.[27], demostró esta hipótesis, haciendo uso de la termodinámica y de la mecánica estadística, y poco tiempo después Perrin la comprobó experimentalmente [28].

Para que este fenómeno sea apreciable se requieren condiciones especiales de densidad y débil interacción. Específicamente, para una partícula de masa m_p que se encuentra suspendida en un fluido constituido por moléculas de masa m_m a temperatura T , se requiere que

$$m_p \gg m_m, \quad (3.1)$$

y que m_p sea lo suficientemente pequeña para que las colisiones de las moléculas del fluido sean apreciables. Es decir, se requiere que la partícula se encuentre en un régimen browniano.

A una partícula con estas características se le llama partícula browniana, y su velocidad media característica, v_c^p , está dada por

$$v_c^p \sim \sqrt{\frac{kT}{m_p}} \ll v_c^m, \quad (3.2)$$

donde k es la constante de Boltzmann y v_c^m es la velocidad media característica de las moléculas del fluido.

En su artículo sobre el movimiento browniano [27], Einstein llevó a cabo un análisis teórico sobre la base del llamado “caminante al azar” y estableció una relación entre las fluctuaciones moleculares del sistema y la naturaleza irreversible del fenómeno de la difusión. La desviación cuadrática media de la partícula browniana respecto al número total de pasos elementales, es una consecuencia de la naturaleza aleatoria de los pasos.

Smoluchowski utilizó una aproximación que en esencia es la misma que la de Einstein, pero difiere en el procedimiento matemático, ya que introduce la función de probabilidad $p_n(\vec{x}|\vec{x}_o)$. Ésta representa la probabilidad de que en una serie de n pasos, la partícula se encuentre en \vec{x} dado que inicialmente, en $t = 0$, se encontraba en \vec{x}_o . Aquí, la suposición importante es que los pasos son independientes entre sí. Para que esto se cumpla se

necesita suponer que la longitud l de cada paso ocurre en un tiempo mayor que el tiempo de correlación de las velocidades de la partícula, τ . En el límite continuo, cuando $l \rightarrow 0$ y $\tau \rightarrow 0$, donde la cantidad $D = \frac{l^2}{\tau}$ es una constante, en un volumen de d^3x alrededor de \vec{x} , la probabilidad $p(\vec{x}, t|\vec{x}_o)$ es la solución a la ecuación de difusión [2, 29]

$$\frac{\partial p(\vec{x}, t|\vec{x}_o)}{\partial t} = D\nabla^2 p(\vec{x}, t|\vec{x}_o), \quad (3.3)$$

donde D es el coeficiente de difusión. Cuando la condición inicial es la delta de Dirac,

$$\lim_{t \rightarrow 0} p(\vec{x}, t|\vec{x}_o) = \delta(x - x_o), \quad (3.4)$$

la solución a la ecuación de difusión es

$$p(\vec{x}, t|\vec{x}_o) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{(\vec{x}-\vec{x}_o)^2}{4Dt}}. \quad (3.5)$$

Por lo tanto, la desviación cuadrática media de la posición está dada por

$$\langle (\vec{x} - \vec{x}_o)^2 \rangle = \int \vec{x}^2 p(\vec{x}, t|\vec{x}_o) d^N \vec{x} = 2NDt, \quad (3.6)$$

siendo N la dimensión del espacio en el que está definido el vector \vec{x} . Este resultado muestra la relación entre la constante macroscópica D con las propiedades microscópicas del sistema. Con este se confirma que el origen del fenómeno proviene de los impactos aleatorios de las moléculas del fluido sobre la partícula browniana [29].

2 Ecuación de Langevin

Después de los trabajos de Einstein y Smoluchowski, Langevin estudió la naturaleza del movimiento browniano considerando que la velocidad de la partícula browniana, moviéndose en un fluido en una dimensión, obedece la siguiente ecuación [29]

$$m \frac{dv(t)}{dt} = -\gamma v(t) + f_s(t) \quad (3.7)$$

donde m es la masa de la partícula y $v(t)$ es su velocidad. Los términos de la derecha representan las fuerzas ejercidas por las moléculas del fluido sobre la partícula. El primer término es en una fuerza disipativa lineal en v , que representa la fricción que experimenta la partícula en el fluido, donde γ es el coeficiente de fricción. El carácter irreversible de la ec.(3.7) reside en este término, que la hace no invariante ante inversiones del tiempo

$t \rightarrow -t$. El término restante, $f_s(t)$, es la fuerza que ejerce el baño sobre la partícula, sobre la cual se pueden postular las siguientes propiedades estadísticas [29]:

(i) $f_s(t)$, es una fuerza aleatoria dada por un proceso estocástico.

(ii) Las propiedades estocásticas de $f_s(t)$ son independientes de v , de manera que $f_s(t)$ actúa como una fuerza externa y su promedio se anula,

$$\langle f_s(t) \rangle = 0, \quad (3.8)$$

donde $\langle \cdot \rangle$ representa el promedio sobre un conjunto representativo de realizaciones. Esta propiedad asegura que no exista flujo neto debido a $f_s(t)$.

(iii) La fuerza $f_s(t)$ es producida por las colisiones de las moléculas del fluido que rodean a la partícula y varía rápidamente. Esto se expresa postulando su función de autocorrelación

$$\langle f_s(t)f_s(t') \rangle = \alpha\delta(t - t'), \quad (3.9)$$

donde α es una constante. La idea es que cada colisión entre las moléculas del fluido y la partícula browniana es prácticamente instantánea y que colisiones sucesivas están descorrelacionadas. En realidad, el lado derecho de la ec.(3.7) debe de ser función de $|t - t'|$ con un pico de ancho igual a la duración de una colisión, la duración de la colisión es el tiempo de correlación del baño. Si se considera que el resto de los tiempos relevantes que caracterizan la dinámica de la partícula browniana son significativamente mayores que el tiempo de correlación del baño, la función delta puede ser usada como una muy buena aproximación. La ec.(3.9) define el llamado ruido blanco o descorrelacionado.

(iv) Se supone que $f_s(t)$ es un proceso aleatorio gaussiano, de manera que con las condiciones (ii) y (iii) el proceso está completamente determinado.

Una fuerza con las propiedades (i), (ii), (iii) y (iv) es llamado fuerza de Langevin o fuerza estocástica térmica. Por brevedad, de aquí en adelante se le llamará a esta fuerza simplemente “fuerza térmica”.

La ecuación de movimiento de la partícula, ec.(3.7), es conocida como la ecuación de Langevin, y define un proceso estocástico cuando una condición inicial está dada, es decir $v(0) = v_o$. Entonces la ec.(3.7) puede resolverse explícitamente, siendo su solución

$$v(t) = v_o e^{-\frac{t}{\tau}} + \int_0^t e^{-\frac{(t-t')}{\tau}} f_s(t') dt', \quad (3.10)$$

donde se ha definido el tiempo de relajamiento de la partícula como

$$\tau = \frac{m}{\gamma}. \quad (3.11)$$

La ec.(3.10) muestra que la velocidad decae exponencialmente a una razón determinada por el tiempo de relajamiento. Utilizando esta solución y la función de autocorrelación, ec.(3.9), se llega a que el promedio del cuadrado de la velocidad está dado por [29]

$$\langle v^2(t) \rangle = v_o^2 e^{-\frac{2t}{\tau}} + \alpha e^{-\frac{2t}{\tau}} \int_0^t dt' \int_0^t e^{-\frac{(t'-t'')}{\tau}} \langle f(t') f(t'') \rangle dt'' \quad (3.12)$$

$$= v_o^2 e^{-\frac{2t}{\tau}} + \frac{\alpha}{2m\gamma} (1 - e^{-\frac{2t}{\tau}}). \quad (3.13)$$

Cuando $t \rightarrow \infty$, la partícula browniana y el baño térmico tienden a un estado de equilibrio entre sí, y la velocidad cuadrática media debe tender al valor de equipartición de la energía $\frac{kT}{m}$. Por lo tanto se llega a que

$$\langle v^2(t) \rangle = \frac{\alpha}{2m\gamma} = \frac{kT}{m}, \quad (3.14)$$

entonces,

$$\alpha = 2kT\gamma. \quad (3.15)$$

Esta ecuación relaciona α , la magnitud de las fluctuaciones, con la constante de disipación γ . Este resultado se conoce como el Teorema de Fluctuación-Disipación [29]. La interpretación física es que las colisiones aleatorias tienden a ensanchar la distribución de velocidades, mientras que el amortiguamiento trata de regresarlas a cero. El balance entre estos dos mecanismos resulta en la distribución de equilibrio, ec.(3.15).

Dado que se conoce la magnitud de las fluctuaciones, se substituye en la ecuación de la autocorrelación de $f_s(t)$, ec.(3.9), de lo que se obtiene

$$\langle f_s(t) f_s(t') \rangle = 2\gamma kT \delta(t - t'). \quad (3.16)$$

Por lo tanto,

$$f_s(t) = \sqrt{2\gamma kT} \xi(t), \quad (3.17)$$

donde $\xi(t)$ representa un ruido blanco gaussiano, de promedio cero, $\langle \xi(t) \rangle = 0$, y cuya función de autocorrelación es

$$\langle \xi(t) \xi(t') \rangle = \delta(t - t'). \quad (3.18)$$

La ec.(3.17) es la expresión que representa la fuerza estocástica debida a las colisiones entre las moléculas del fluido y la partícula browniana cuando el tiempo de correlación del baño es menor que el resto de los tiempos relevantes del sistema. Esta expresión es la que se utilizará más adelante para la fuerza térmica.

Partiendo de la ecuación de Langevin, ec.(3.7), es posible obtener la difusión de la partícula en el fluido. Para ello, se multiplica a ésta por la posición instantánea x y se promedia. De este procedimiento se llega a que [3]

$$\frac{d^2}{dt^2}\langle x^2 \rangle + \frac{1}{\tau} \frac{d}{dt}\langle x^2 \rangle = 2\langle v^2 \rangle. \quad (3.19)$$

Suponiendo que la partícula browniana ya ha alcanzado el equilibrio térmico con el baño, se substituye la velocidad cuadrática media por su valor de equipartición, ec.(3.14). Integrando se obtiene

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2kT}{m} \tau^2 \left(\frac{t}{\tau} - (1 - e^{-\frac{t}{\tau}}) \right). \quad (3.20)$$

Entonces, para $t \ll \tau$, la expresión se reduce a

$$\langle x^2 \rangle \cong \frac{kT}{m} t^2 = \langle v^2 \rangle t^2, \quad (3.21)$$

que es consistente con las ecuaciones reversibles de Newton. Mientras que para tiempos mayores al tiempo de relajamiento, $t \gg \tau$, se obtiene la relación de Einstein

$$\langle x^2 \rangle \cong \frac{2kT}{m} \tau t = 2Dt. \quad (3.22)$$

Aquí el coeficiente de difusión es

$$D = \frac{kT}{\gamma}. \quad (3.23)$$

Esta ecuación expresa la relación entre la disipación y la difusión. Es decir, tanto la fricción como la difusión provienen de las fluctuaciones del sistema.

De promediar la ec.(3.7) e integrando se llega a que, para $t \gg \tau$,

$$\langle x(t) \rangle = 0. \quad (3.24)$$

En otras palabras, la posición del conjunto de partículas brownianas, inicialmente concentradas en el origen, se difunde a medida que transcurre el tiempo con promedio cero y desviación cuadrática media $2Dt$. De manera que, el proceso difusivo no genera transporte neto. La ec.(3.24) muestra que las partículas brownianas se difunden de manera simétrica alrededor de la posición inicial.

Es importante reiterar que la escala de tiempo correspondiente a la función de correlación de la velocidad ($\langle v(0)v(t) \rangle$) está dada por el tiempo de relajamiento τ del movimiento browniano. Este debe ser muchos órdenes de magnitud mayor que el tiempo característico τ_o de las funciones de correlación $\langle f(0)f(t) \rangle$. Es decir, $\tau \gg \tau_o$.

3 Ecuación de Langevin en presencia de fuerzas conservativas

Una vez analizada la ecuación de Langevin se harán las aproximaciones pertinentes y se introducirán los términos correspondientes a las fuerzas necesarias para modelar el problema que se desea estudiar.

3.1 Régimen sobreamortiguado

Hasta el momento se ha considerado el término correspondiente a la inercia en la ecuación de movimiento, ec(3.7). Pero, para los sistemas biológicos a los que está enfocado este trabajo, el tiempo de relajamiento $\tau = \frac{m}{\gamma}$ resulta ser muchos órdenes de magnitud más pequeño que el resto de los tiempos involucrados en la ecuación, debido a que se trata de sistemas en los que la masa es muy pequeña en relación a la viscosidad [12]. Por lo tanto, es posible despreciar el término inercial, considerando el sistema en el régimen sobreamortiguado. En dicho caso, la ecuación de Langevin se reduce a

$$\gamma \frac{dx(t)}{dt} \cong f_s(t). \quad (3.25)$$

con condición inicial $x(0) = x_o$.

3.2 Potencial tipo matraca

El primero de los términos que se introduce en la ecuación de Langevin es aquel que representa a la fuerza ejercida por un potencial conservativo periódico y asimétrico $V(x)$, de periodo λ , $V(x + \lambda) = V(x)$. Se trabajará con un potencial tipo matraca (en inglés *ratchet potential*) [3, 4], que se muestra en la Figura 3.1 y cuya ecuación que lo describe es

$$V(x) = -V_o \left[\sin \left(2\pi \frac{x}{\lambda} \right) + \frac{4}{10} \sin \left(4\pi \frac{x}{\lambda} \right) + \frac{2}{10} \sin \left(6\pi \frac{x}{\lambda} \right) \right]. \quad (3.26)$$

Este potencial tiene dos parámetros independientes, la amplitud V_o y el periodo λ . La asimetría del potencial permanecerá invariante a lo largo del análisis. Al incluir la fuerza debida a este potencial, la ecuación de Langevin toma la siguiente forma

$$\gamma \frac{dx(t)}{dt} = -\frac{dV(x)}{dx} + f_s(t). \quad (3.27)$$

Esta ecuación diferencial es no lineal debido a la forma del potencial.

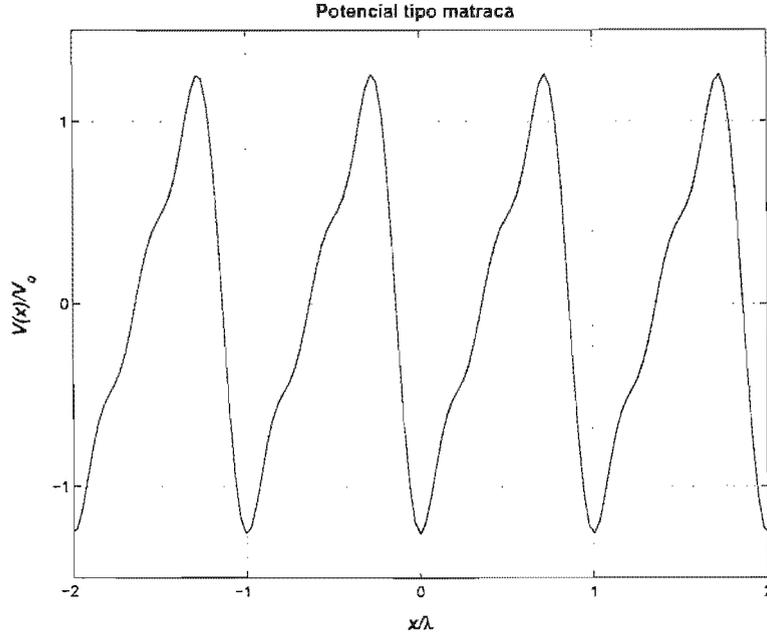


Figura 3.1: Potencial conservativo periódico y asimétrico, de periodo λ y amplitud V_0 .

3.3 Fuerza externa aleatoria

Se introduce una fuerza externa aleatoria y dependiente del tiempo $F_e(t)$, con el propósito de mantener al sistema fuera del equilibrio termodinámico. Esta fuerza presenta memoria, es decir, está correlacionada en el tiempo. Su distribución es gaussiana y su promedio es cero, $\langle F_e(t) \rangle = 0$. Para que esta fuerza presente memoria, debe tener un tiempo de correlación mayor al tiempo de correlación del baño y mayor al tiempo característico del sistema. Así, esta fuerza estocástica representa un ruido de color o correlacionado, en contraste con la del baño térmico que es un ruido blanco o descorrelacionado. Dicha fuerza será llamada simplemente “fuerza externa” y está descrita por la siguiente ecuación diferencial

$$\frac{dF_e(t)}{dt} = -\frac{F_e(t)}{\tau_e} + \zeta(t), \quad (3.28)$$

donde τ_e es el tiempo de correlación de la fuerza externa y $\zeta(t)$ es un ruido blanco gaussiano de promedio cero, $\langle \zeta(t) \rangle = 0$, con la siguiente función de autocorrelación

$$\langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = \frac{f_o^2}{\tau_e^2} \delta(t - t'), \quad (3.29)$$

donde f_o es una constante relacionada con la magnitud de las fluctuaciones de la fuerza externa aleatoria. Una fuerza que cumple con las características mencionadas es conocida como ruido de Ornstein-Uhlenbeck y la solución a la ecuación diferencial que la describe, ec.(3.28), está dada por

$$F_e(t) = e^{-\frac{t}{\tau_e}} F_e(0) + \int_0^t e^{-\frac{(t-s)}{\tau_e}} \zeta(s) ds. \quad (3.30)$$

Si se impone la condición inicial

$$F_e(0) = 0, \quad (3.31)$$

se tiene que

$$F_e(t) = \int_0^t e^{-\frac{(t-s)}{\tau_e}} \zeta(s) ds. \quad (3.32)$$

De aquí se sigue que $\langle F_e(t) \rangle = 0$, dado que $\langle \zeta(t) \rangle = 0$.

Una vez que se tiene la expresión explícita de la fuerza, es posible encontrar su función de autocorrelación, ésta es

$$\langle F_e(t) F_e(t') \rangle = \int_{-\infty}^t \int_{-\infty}^{t'} e^{-\frac{(t-s)}{\tau_e}} \langle \zeta(s) \zeta(q) \rangle ds dq. \quad (3.33)$$

Resolviendo esta ecuación y tomando en cuenta que la autocorrelación de $\zeta(t)$ está dada por ec.(3.29), se llega a que

$$\langle F_e(t) F_e(t') \rangle = \frac{f_o^2}{2\tau_e} e^{-\frac{(t-t')}{\tau_e}}. \quad (3.34)$$

Esta expresión muestra como la fuerza presenta efectos no locales en el tiempo (memoria) y su correlación es exponencial. De la ecuación ec.(3.34) se sigue que

$$\langle F_e^2(t) \rangle = \frac{f_o^2}{2\tau_e}. \quad (3.35)$$

Por lo tanto, la magnitud de la fuerza externa está dada por $\frac{f_o}{\sqrt{2\tau_e}}$.

Del análisis de esta fuerza se tienen los elementos suficientes para demostrar que las ecuaciones de evolución de $\langle F_e(t) \rangle$ y de $\langle F_e^2(t) \rangle$ son

$$\frac{\partial \langle F_e(t) \rangle}{\partial t} = -\frac{1}{\tau_e} \langle F_e(t) \rangle = 0, \quad (3.36)$$

y

$$\frac{\partial \langle F_e^2(t) \rangle}{\partial t} = -\frac{2}{\tau_e} \langle F_e^2(t) \rangle + \frac{f_o^2}{2\tau_e^2} = -\frac{f_o^2}{2\tau_e^2}, \quad (3.37)$$

respectivamente.

Recapitulando, se tiene que la ecuación de Langevin para una partícula browniana sobreamortiguada en un fluido, sometida a un potencial periódico asimétrico y sujeta a una fuerza externa aleatoria dependiente del tiempo y correlacionada es

$$\frac{dx(t)}{dt} = -\frac{dV(x)}{dx} + f_s(t) + F_e(t). \quad (3.38)$$

Esta es una ecuación diferencial no lineal con dos términos estocásticos introducidos a través de los ruidos blancos gaussianos $\xi(t)$ y $\zeta(t)$.

4 Ecuación de Fokker-Planck

Para que un proceso estocástico sea descrito por una ecuación de Fokker-Planck se requiere que sea markoviano. Un proceso markoviano es aquel en el que se puede conocer el estado de un sistema al tiempo $t + dt$ dados el estado del sistema al tiempo t y la probabilidad de transición entre ambos estados. La solución a una ecuación de Langevin, que represente un proceso markoviano en el caso sobreamortiguado, puede ser expresada en términos de la probabilidad condicional $W(x, t|x_o, t_o)dx$. Esta es la probabilidad de encontrar a la partícula entre x y dx al tiempo t , dado que se encontraba en x_o al tiempo t_o [31]. Dicha distribución de probabilidad tiene como propiedades que en el límite en que $t \rightarrow t_o$ se reduce a una delta de Dirac, es decir,

$$\lim_{t \rightarrow t_o} W(x, t|x_o, t_o) = \delta(x - x_o). \quad (3.39)$$

Debido a que, en general, la presencia de una fuerza externa dependiente del tiempo, $F_e(t)$, en la ecuación de Langevin en cuestión, ec.(3.38), la probabilidad condicional correspondiente $W(x, t|x_o, t_o)dx$ representa un proceso no-markoviano. Sin embargo, si se incluye a la fuerza externa como parte de un sistema más grande, donde la probabilidad condicional esté dada por $\mathcal{W}(x, F_e, t|x_o, F_e^{(o)}, t_o)dx dF_e$, entonces, ésta sí representa un proceso markoviano y en consecuencia $\mathcal{W}(x, F_e, t)$ es solución de una ecuación de Fokker-Planck [32].

La ecuación de Fokker-Planck del problema en cuestión se deduce a continuación mediante el procedimiento desarrollado por Chandrasekhar [31], descrito en detalle en el Apéndice A. Se parte del sistema de ecuaciones

$$\gamma \frac{dx(t)}{dt} = -\frac{dV(x)}{dx} + f_s(t) + F_e(t). \quad (3.40)$$

$$\frac{dF_e(t)}{dt} = -\frac{F_e(t)}{\tau_e} + \zeta(t), \quad (3.41)$$

donde las relaciones de autocorrelación de los ruidos $f_s(t)$ y $\zeta(t)$, como se ha visto, están dadas por

$$\langle f_s(t)f_s(t') \rangle = 2\gamma kT\delta(t-t'), \quad (3.42)$$

y

$$\langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = \frac{f_o^2}{\tau_e^2}\delta(t-t'), \quad (3.43)$$

respectivamente. Primero se calcula la probabilidad de transición

$$\psi(x, F_e; \Delta x, \Delta F_e), \quad (3.44)$$

de que en un intervalo de tiempo Δt , x y F_e sufran un incremento de

$$\Delta x = x(t + \Delta t) - x(t), \quad (3.45)$$

y

$$\Delta F_e = F_e(t + \Delta t) - F_e(t), \quad (3.46)$$

respectivamente.

El intervalo Δt debe ser suficientemente grande para que no exista correlación entre $f_s(t)$ y $f_s(t + \Delta t)$, y entre $\zeta(t)$ y $\zeta(t + \Delta t)$, que varían rápidamente. Asimismo, Δt debe ser tal que $\frac{dV(x)}{dx}$ y F_e , que varían más lentamente, puedan ser aproximadas por constantes en dicho intervalo de tiempo.

A continuación, el objetivo es encontrar la función de distribución $\mathcal{W}(x, F_e; t + \Delta t)$, que gobierna la probabilidad de ocurrencia de x y F_e al tiempo $t + \Delta t$, a partir de la distribución $\mathcal{W}(x, F_e; t)$, al tiempo t , y de la probabilidad de transición $\psi(x, F_e; \Delta x, \Delta F_e)$. Esto es posible a través de la expresión

$$\begin{aligned} \mathcal{W}(x, F_e; t + \Delta t) = & \quad (3.47) \\ \int \int \mathcal{W}(x - \Delta x, F_e - \Delta F_e; t) \psi(x - \Delta x, F_e - \Delta F_e; \Delta x, \Delta F_e) d\Delta x d\Delta F_e, \end{aligned}$$

conocida como la ecuación de Chapman-Kolmogorov [29, 31]. Esta ecuación siempre es válida para procesos markovianos que, como se ha mencionado, es el caso para $\mathcal{W}(x, F_e; t)$.

Para hallar la probabilidad de transición $\psi(x, F_e; \Delta x, \Delta F_e)$, se integran las ecs.(3.40) y (3.41) en el intervalo Δt , obteniéndose (ver Apéndice A)

$$\Delta x + \frac{1}{\gamma} \frac{dV(x)}{dx} \Delta t - \frac{1}{\gamma} F_e(t) \Delta t = B_x(\Delta t) \quad (3.48)$$

y

$$\Delta F_e + \frac{F_e}{\tau_e} \Delta t = B_{F_e}(\Delta t), \quad (3.49)$$

donde

$$B_x(\Delta t) = \frac{1}{\gamma} \int_t^{t+\Delta t} f_s(t) dt', \quad (3.50)$$

y

$$B_{F_e}(\Delta t) = \frac{1}{\gamma} \int_t^{t+\Delta t} \zeta(t) dt'. \quad (3.51)$$

La cantidad $B_x(\Delta t)$ representa el cambio en la posición de la partícula browniana debido a las colisiones ocurridas durante el intervalo de tiempo Δt . Del mismo modo, $B_{F_e}(\Delta t)$ representa el cambio en la fuerza externa proveniente de las fluctuaciones que la originan en dicho intervalo. Es a partir de estas cantidades que se construye la probabilidad de transición. Para ello se toman las ecs.(3.48) y (3.49), y se hace la suposición de que las distribuciones de probabilidad de $B_x(\Delta t)$ y $B_{F_e}(\Delta t)$ se tienden a distribuciones gaussianas cuando $t \rightarrow \infty$, es decir, la probabilidad de ocurrencia de los diferentes valores de $\vec{B}(\Delta t)$ ($\vec{B}(\Delta t) = (B_x(\Delta t), B_{F_e}(\Delta t))$) está gobernada por la función de distribución [31]

$$\omega(\vec{B}(\Delta t)) = \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_{F_e}} e^{\left(-\frac{B_x^2}{2\sigma_x^2} - \frac{B_{F_e}^2}{2\sigma_{F_e}^2}\right)}. \quad (3.52)$$

A partir de esta distribución, se calculan los segundos momentos de $B_x(\Delta t)$ y $B_{F_e}(\Delta t)$, obteniéndose

$$\langle B_x^2 \rangle = \sigma_x^2 = \frac{2kT}{\gamma} \Delta t, \quad (3.53)$$

y

$$\langle B_{F_e}^2 \rangle = \sigma_{F_e}^2 = \frac{f_o^2}{\gamma_e^2} \Delta t. \quad (3.54)$$

Si se substituyen estos resultados, además de las ecs.(3.48) y la ec.(3.49), en la función de probabilidad, ec.(3.52), se llega a que la función de probabilidad de transición está dada por

$$\psi(x, F_e; \Delta x, \Delta F_e) = C e^{A_1(x, F_e, t)} e^{A_2(x, F_e, t)}, \quad (3.55)$$

donde

$$C = \sqrt{\frac{\gamma\tau_e^2}{8\pi^2 kT f_o^2 \Delta t^2}},$$

$$A_1(x, F_e, t) = \left(-\frac{\Delta x + \frac{1}{\gamma} \frac{dV(x)}{dx} \Delta t - \frac{1}{\gamma} F_e(t) \Delta t}{4kT \Delta t / \gamma} \right)^2,$$

$$A_2(x, F_e, t) = \left(-\frac{|\Delta F_e + \frac{F_e}{\tau_e} \Delta t|^2}{2f_o^2 \Delta t / \tau_e^2} \right).$$

Una vez hallada la probabilidad de transición, se desarrollan en series de Taylor $\mathcal{W}(x, F_e; t + \Delta t)$, $\mathcal{W}(x - \Delta x, F_e - \Delta F_e; t)$ y $\psi(x - \Delta x, F_e - \Delta F_e; \Delta x, \Delta F_e)$ en la ec.(3.47); se escribe la expresión en términos de los promedios, definidos como

$$\langle \Delta f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Delta f \psi dx dF_e, \quad (3.56)$$

y se calculan estos promedios a partir de la probabilidad de transición ψ encontrada. Finalmente, se divide la serie de Taylor entre Δt y se toma el límite $\Delta t \rightarrow 0$. De este modo, se llega a la ecuación de Fokker-Planck correspondiente

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{W}(x, F_e, t) = & \left[-\frac{1}{\gamma} F_e \frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{dV(x)}{dx} + kT \frac{\partial}{\partial x} \right) \right. \\ & \left. + \frac{1}{\tau_e} \frac{\partial}{\partial F_e} \left(F_e + \frac{f_o^2}{2\tau_e} \frac{\partial}{\partial F_e} \right) \right] \mathcal{W}(x, F_e, t). \end{aligned} \quad (3.57)$$

Esta ecuación de Fokker-Planck coincide con la encontrada por Risken, ref.[32]. Los dos términos con segundas derivadas de $\mathcal{W}(x, F_e, t)$ son términos de *difusión*, mientras que el resto son términos de *arrastré*. Se observa que, tanto la fuerza térmica como la externa contribuyen a la difusión de la partícula browniana.

A continuación se muestran y discuten algunos casos particulares a los que se reduce la ecuación de Fokker-Planck, ec.(3.57), al modificar ciertas propiedades del sistema:

a) Cuando no existen tanto potencial, $V(x) = 0$, como fuerza externa, $F_e(t) = 0$, la ecuación de Fokker-Planck se reduce a la ecuación de difusión

$$\frac{\partial}{\partial t} W(x, t) = \frac{kT}{\gamma} \frac{\partial^2}{\partial x^2} W(x, t), \quad (3.58)$$

b) Cuando sí existe un potencial, $V(x) \neq 0$, y la fuerza externa representa un ruido blanco, esto es, una fuerza aleatoria no correlacionada con $F_e(t) = \zeta(t)$, donde

$$\langle \zeta(t) \zeta(t') \rangle = f_o^2 \delta(t - t'). \quad (3.59)$$

el problema se transforma en uno que contiene dos ruidos blancos gaussianos independientes y descorrelacionados entre sí. Por lo tanto, $\vartheta(t) = f_s(t) \div \zeta(t)$ es también un ruido blanco gaussiano. Adicionalmente, debido a que $f_s(t)$ y $\zeta(t)$ están descorrelacionados, se tiene que

$$\langle \vartheta(t) \vartheta(t') \rangle = (2\gamma kT + f_o^2) \delta(t - t'). \quad (3.60)$$

De modo que añadir dicha fuerza externa resulta equivalente a incrementar la temperatura del baño de T a una temperatura efectiva $T_{ef} = T + T_e$, donde $2\gamma kT_e = f_o^2$. Entonces, la ecuación de Fokker-Planck correspondiente al caso en que la fuerza externa aleatoria es blanca, coincide con aquella en la que no existe fuerza externa alguna, excepto que en lugar de T aparece T_{ef} , que incluye la contribución de la fuerza externa. Aquí, igual que en el inciso a), deja de aparecer la variable independiente F_e y la distribución W sólo depende de x y t , $W = W(x, t)$. La ecuación de Fokker-Planck para este caso es

$$\frac{\partial}{\partial t} W(x, t) = \left[\frac{1}{\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{dV(x)}{dx} + kT_{ef} \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] W(x, t). \quad (3.61)$$

c) Finalmente [12, 32, 33], se sabe que la ecuación de Fokker-Planck equivalente a la ecuación de Langevin en presencia de un potencial $V(x)$ y una fuerza externa dependiente del tiempo y no correlacionada $F(t)$ es

$$\frac{\partial}{\partial t} W(x, t) = \left[\frac{1}{\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{dV(x)}{dx} - F(t) \right) + \frac{kT}{\gamma} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] W(x, t), \quad (3.62)$$

con la condición de que fuerza $F(t)$ varíe lentamente. Se observa que las ecs.(3.57) y (3.62) coinciden excepto en los últimos dos términos de la derecha de la ec.(3.57). Estos términos aparecen debido a que la fuerza externa dependiente del tiempo es una fuerza estocástica y está correlacionada.

5 El estado estacionario

La probabilidad $W(x, F_e, t)$ con x definida en todo el espacio, $-\infty < x < \infty$, en general no tiende a un estado estacionario en el límite cuando $t \rightarrow \infty$ [29].

En ausencia de fuerzas externas dependientes del tiempo, $F_e(t) = 0$, el sistema se encuentra en equilibrio termodinámico. Entonces, por el Teorema de Fluctuación-Disipación, el sistema alcanza un estado estacionario

$$\lim_{t \rightarrow \infty} W(x, t | x_o, t_o) \rightarrow W_s(x), \quad (3.63)$$

donde la probabilidad estacionaria $W_s(x)$ está definida por

$$W_s(x) = N e^{-\beta V(x)}, \quad (3.64)$$

donde N es la constante de normalización y $\beta = \frac{1}{kT}$. Sin embargo, debido a que x está definida en todo el espacio, $-\infty < x < \infty$, esto es cierto siempre y cuando el potencial $V(x)$ esté acotado por abajo y cuando

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} V(x) \rightarrow \infty. \quad (3.65)$$

De lo contrario, por ejemplo en el caso en que $V(x)$ es constante, ó en el caso aquí estudiado, donde $V_{min} \leq V(x) \leq V_{max} < \infty$, la probabilidad $W_s(x)$ no se puede normalizar y no es integrable, además de que su segundo momento diverge. De modo que en estos casos estrictamente no existe un estado estacionario.

Sin embargo, en este caso sí es posible definir una probabilidad relativa entre dos posiciones x y x' para el estado estacionario, esto es

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{W(x, t)}{W(x', t)} = e^{-\beta(V(x) - V(x'))}, \quad (3.66)$$

ya que esta probabilidad relativa es independiente de la constante de normalización.

Por otra lado, dada la ausencia de fuerzas externas, sí existe equilibrio termodinámico en el sistema. Y por tratarse de sistemas cerrados, aplica la Segunda Ley de la Termodinámica. En consecuencia, no es posible obtener trabajo del sistema.

Cuando se agrega una fuerza estocástica dependiente del tiempo, $F_e(t) \neq 0$, se rompe el equilibrio termodinámico. El sistema recibe constantemente energía de la fuerza externa, la cual es incapaz de regresar al agente externo para establecer un balance. Lo último se corrobora en la ecuación de Fokker-Planck, ec.(3.57), donde se observa la presencia del término $-\frac{1}{\gamma} F_e \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{W}(x, F_e, t)$, a través del cual se acoplan ambas variables independientes y que es el responsable de que la posición x de la partícula se vea afectada por fuerza externa F_e . Para que exista equilibrio termodinámico se requiere la presencia de un término recíproco que haga que las fuerzas que actúan sobre la partícula provengan de un potencial.

El constante suministro de energía implica que la probabilidad $\mathcal{W}(x, F_e, t)$ debe cambiar conforme transcurre el tiempo, es decir, no llega a un estado estacionario. El sistema no está en equilibrio termodinámico y la Segunda Ley de la Termodinámica no aplica, dado que se trata de un sistema abierto. Por lo tanto, en este caso sí es posible obtener un trabajo neto.

Si el sistema no alcanza un estado estacionario, se sigue que los promedios de las cantidades físicas, definidos por

$$\langle f \rangle(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, F_e) \mathcal{W}(x, F_e, t) dx dF_e \quad (3.67)$$

tampoco tienden a un estado estacionario y en general son funciones dependientes del tiempo.

De alcanzarse el estado estacionario todos los promedios de las cantidades físicas, en particular $\langle x \rangle$, serían constantes (independientes del tiempo). Esto, como se discutirá más adelante, tiene como consecuencia inmediata la ausencia de corriente.

Entonces, para poder extraer trabajo del sistema en forma de corriente, es necesario que éste no alcance un estado estacionario y que exista una fuerza externa dependiente del tiempo que rompa el equilibrio termodinámico.

6 Ecuaciones de evolución de los promedios

A partir de la ecuación de Fokker-Planck, ec.(3.57), es posible construir las ecuaciones de evolución de los promedios de las diferentes cantidades relevantes en el problema. Para ello, se multiplica dicha ecuación por la cantidad física a considerar, por ejemplo la posición, y se integra respecto a las variables independientes x y F_e , con lo que el lado izquierdo de la ec.(3.57) toma la siguiente forma

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial \mathcal{W}}{\partial t} dx dF_e = \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x \mathcal{W} dx dF_e = \frac{d \langle x \rangle}{dt} \quad (3.68)$$

En este caso, al resolver las integrales del lado derecho de la ec.(3.57), recordando que $\langle F_e \rangle = 0$ y considerando que

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \mathcal{W} \rightarrow 0, \quad (3.69)$$

y

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{\partial \mathcal{W}}{\partial t} \rightarrow 0, \quad (3.70)$$

se llega a que el promedio de la posición está gobernado por la ecuación de evolución

$$\frac{d \langle x \rangle}{dt} = -\frac{1}{\gamma} \left\langle \frac{dV(x)}{dx} \right\rangle. \quad (3.71)$$

Esta expresión resulta de gran interés ya que $\frac{d \langle x \rangle}{dt}$ representa la velocidad promedio de la partícula browniana. Más adelante se discute en detalle esta cantidad.

Si se hace el mismo procedimiento para las cantidades x^2 , F_e , F_e^2 , $V'(x)$, $x F_e$, $x V'(x)$ y $F_e V'(x)$, se obtienen las siguientes ecuaciones de evolución de sus promedios

$$\frac{d \langle x^2 \rangle}{dt} = \frac{2}{\gamma} \langle x F_e \rangle - \frac{2}{\gamma} \langle x V'(x) \rangle + 2 \frac{kT}{\gamma}, \quad (3.72)$$

$$\frac{d\langle F_e \rangle}{dt} = -\frac{1}{\tau_e} \langle F_e \rangle = 0, \quad (3.73)$$

$$\frac{d\langle F_e^2 \rangle}{dt} = -\frac{2}{\tau_e} \langle F_e^2 \rangle + \frac{f_o^2}{\tau_e^2} = -\frac{f_o^2}{2\tau_e^2}, \quad (3.74)$$

$$\frac{d\langle xF_e \rangle}{dt} = \frac{1}{\gamma} \langle F_e^2 \rangle - \frac{1}{\gamma} \langle F_e V'(x) \rangle + \frac{1}{\tau_e} \langle xF_e \rangle + \frac{f_o^2}{\tau_e^2}, \quad (3.75)$$

$$\frac{d\langle V'(x) \rangle}{dt} = \frac{1}{\gamma} \langle V''(x)F_e \rangle - \frac{1}{\gamma} \langle V''(x)V'(x) \rangle + \frac{kT}{\gamma} \langle V'''(x) \rangle, \quad (3.76)$$

$$\frac{d\langle xV'(x) \rangle}{dt} = \frac{1}{\gamma} \langle F_e V'(x) \rangle - \frac{1}{\gamma} \langle (V'(x))^2 \rangle + \frac{kT}{\gamma} \langle V'(x) + V''(x)(x+1) \rangle, \quad (3.77)$$

$$\frac{d\langle F_e V'(x) \rangle}{dt} = \frac{1}{\gamma} \langle F_e V''(x) \rangle - \frac{1}{\gamma} \langle F_e^2 V''(x) \rangle + \frac{kT}{\gamma} \langle F_e V'''(x) \rangle. \quad (3.78)$$

Aquí se utiliza la notación $V'(x) = \frac{dV(x)}{dx}$, $V''(x) = \frac{d^2V(x)}{dx^2}$, etc. Algunas de estas ecuaciones de evolución, como las correspondientes a los promedios de x , F_e , F_e^2 , etc., pueden también ser deducidas directamente de las ecs.(3.40) y (3.41) (*i.e.* la ec.(3.36) es igual a la ec.(3.73) y la ec.(3.37) es igual a la ec.(3.74)). Esto sustenta el hecho de que la ecuación de Fokker-Planck, ec.(3.57), es equivalente a las ecs.(3.40) y (3.41), y que representan el mismo sistema.

7 Existencia de corriente

Una vez hallada la ecuación de Fokker-Planck y las ecuaciones de evolución de los promedios, se centrará la atención en la corriente de la partícula browniana $\langle \frac{dx}{dt} \rangle$, que es la cantidad de mayor interés en el contexto del transporte en sistemas periódicos.

La manera más sencilla de establecer una relación para $\langle \frac{dx}{dt} \rangle$ es promediando la ecuación de Langevin, ec.(3.38), y tomando en cuenta que el promedio de ambas fuerzas estocásticas es cero, de donde se obtiene que

$$\left\langle \frac{dx}{dt} \right\rangle = -\frac{1}{\gamma} \left\langle \frac{dV(x)}{dx} \right\rangle. \quad (3.79)$$

Por otro lado, es bien sabido que $\mathcal{W}(x, F_e, t)$ contiene la información completa sobre el sistema, por lo que se recurrirá a ella para extraer la forma y las propiedades de la corriente.

Se tiene entonces que la ecuación de Fokker-Planck, ec.(3.57), puede ser expresada en forma de la siguiente *ecuación maestra* [32]

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{W}(x, F_e, t) = -\nabla \cdot \vec{J}(x, F_e, t), \quad (3.80)$$

Esta ecuación maestra tiene la forma de una ecuación de continuidad asociada con la conservación de la probabilidad, de modo que $\vec{J}(x, F_e, t)$ es llamada *corriente de probabilidad*, donde $\vec{J} = (J_x, J_{F_e})$. Por lo tanto, la ec.(3.80) puede escribirse como

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{W}(x, F_e, t) = -\frac{\partial}{\partial x} J_x - \frac{\partial}{\partial F_e} J_{F_e}. \quad (3.81)$$

Al relacionar la ecuación de Fokker-Planck, ec.(3.57), con la ecuación maestra, ec.(3.81), se llega a que

$$J_x = \frac{1}{\gamma} \left[F_e \mathcal{W} - \frac{dV(x)}{dx} \mathcal{W} - kT \frac{\partial \mathcal{W}}{\partial x} \right], \quad (3.82)$$

y

$$J_{F_e} = -\frac{1}{\tau_e} \left[F_e \mathcal{W} + \frac{f_o^2}{2\tau_e} \frac{\partial \mathcal{W}}{\partial F_e} \right]. \quad (3.83)$$

La cantidad que se busca es la corriente total en la dirección x , que se define como

$$j_x = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} J_x dx dF_e. \quad (3.84)$$

Así, al resolver las integrales, se obtiene

$$j_x = -\frac{1}{\gamma} \left\langle \frac{dV(x)}{dx} \right\rangle. \quad (3.85)$$

Recordando ahora la ecuación de evolución para el promedio de la posición de partícula browniana, hallada en la sección anterior, ec.(3.71), y tomando en cuenta la expresión deducida de la ecuación de Langevin para la corriente, ec.(3.79), se tiene que la corriente total en la dirección x es

$$j_x = \frac{d\langle x \rangle}{dt} = \left\langle \frac{dx}{dt} \right\rangle = -\frac{1}{\gamma} \left\langle \frac{dV(x)}{dx} \right\rangle. \quad (3.86)$$

En esta serie de igualdades se observa que, como era de esperarse, la derivada respecto al tiempo puede ser extraída del promedio. Por otro lado, queda claro que la corriente coincide con la definición natural y que esto es congruente tanto para ecuación de Fokker-Planck como para la de Langevin.

Mediante el uso de este resultado se analiza el caso donde el potencial $V(x)$ es simétrico. Esto implica que $V(x)$ es una función par. Por lo tanto, $\frac{dV(x)}{dx}$ es una función impar. En este caso se puede demostrar que $\mathcal{W}(x, F_e, t) = \mathcal{W}(-x, F_e, t)$, es decir, \mathcal{W} es una función par. Dado que el promedio de $\frac{dV(x)}{dx}$ se define como

$$\left\langle \frac{dV(x)}{dx} \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dV(x)}{dx} \mathcal{W}(x, F_e, t) dx dF_e. \quad (3.87)$$

y debido a que el integrando es el producto de una función par por una función impar, éste es impar y la integral es siempre cero. Así, haciendo uso de la expresión para la corriente total en la dirección x , se llega a que

$$j_x = -\frac{1}{\gamma} \left\langle \frac{dV(x)}{dx} \right\rangle = 0. \quad (3.88)$$

Por lo tanto, si el potencial es simétrico no existe corriente, dadas las condiciones del sistema aquí estudiado. Sin embargo, aún para $V(x)$ simétrico podría haber corriente si por ejemplo se introduce un asimetría en el sistema a través de $F_e(t)$ [6, 12].

Por otra parte y como ya se ha discutido, si se considera el caso en que no hay fuerza externa, $F_e = 0$, o que ésta es una fuerza aleatoria descorrelacionada, el sistema se encuentra en equilibrio termodinámico y por la Segunda Ley de la Termodinámica no es posible obtener corriente, ya sea el potencial asimétrico o no.

En conclusión, para que el sistema pueda presentar corriente, se requiere de algún mecanismo que rompa la simetría espacial y de una fuente externa de energía que lo mantenga fuera del equilibrio termodinámico. Sin embargo, la interacción entre dichos mecanismos no está del todo comprendida, y no existe aún una explicación clara sobre la dinámica subyacente que controla la generación de corriente en este tipo de sistemas. El análisis aquí presentado, establece únicamente los límites sobre las condiciones requeridas para que exista corriente.

8 Solución numérica de la ecuación de Langevin

La ecuación de Langevin, ec.(3.38), describe la dinámica de una partícula en el régimen sobreamortiguado, inmersa en un baño térmico, bajo la influencia de un potencial periódico asimétrico y sujeta a una fuerza externa aleatoria correlacionada. Dicha ecuación presenta enormes dificultades para ser resuelta analíticamente, principalmente por el carácter no

lineal de la fuerza debida al potencial $V(x)$. Por esta razón, en la presente sección se buscan soluciones numéricas de la ecuación de Langevin.

La ec.(3.38) presenta comportamientos cualitativamente diferentes para diferentes valores de los parámetros. Sin embargo, a pesar de no conocerse la solución general a este problema, de las refs.[4, 5, 7, 9–11] y del análisis realizado en las secciones previas, se sabe bajo que condiciones no debe existir corriente.

Como se ha visto, la corriente está dada por la cantidad $\frac{d\langle x \rangle}{dt}$. Se entenderá que existe corriente si dicha cantidad resulta ser distinta de cero, para un número suficientemente grande de realizaciones y en regímenes para los cuales el estado transitorio haya sido superado.

8.1 Método numérico

Para el cálculo de la solución numérica de la ecuación de Langevin, (3.38), se elaboraron programas en lenguaje FORTRAN (ver Apéndice B). El algoritmo utilizado para resolver la ecuación hace uso del método de Euler y está basado en la definición de derivada

$$\frac{dx(t)}{dt} \cong \frac{x(t) - x(t - \Delta t)}{\Delta t}, \quad (3.89)$$

donde Δt es el paso de tiempo en el algoritmo mediante el cual se discretiza el problema. Este tiempo debe cumplir ciertas condiciones. Para que los efectos de memoria de la fuerza externa sean tomados en cuenta se debe cumplir que $\Delta t \ll \tau_e$. Sin embargo, debido a que se está considerando que el ruido del baño térmico es blanco, Δt debe ser mucho mayor que el tiempo de correlación del baño. Por otro lado, el método numérico debe converger a la solución del problema continuo cuando $\Delta t \rightarrow 0$. Si Δt es demasiado grande el método no rescatará el detalle del problema y la solución se alejará de la del problema original. Además de cumplir las condiciones mencionadas, el paso de tiempo debe ser lo suficientemente fino para que esto último no suceda, sin ser demasiado pequeño, ya que podrían aparecer problemas de precisión de la computadora.

Con el propósito de encontrar un valor adecuado para Δt , se definió un intervalo dentro del cuál se cumplen las condiciones antes descritas. A continuación se ensayó con diferentes valores de Δt dentro de dicho intervalo, revisando que, en los casos límite del sistema, los resultados del método numérico coincidieran adecuadamente con las soluciones conocidas [4, 5, 7, 9–11]. Se encontró que el intervalo de tiempo óptimo es $\Delta t = 10^{-4}$.

En número total de pasos de tiempo Δt empleado fue de 10^7 , con lo que t abarca el intervalo $[0, 10^3]$. La elección de este intervalo de tiempo se debe a que el estado transitorio no llega más allá de $t \approx 50$. Para tener una estadística suficientemente buena, se consideró un número de realizaciones de entre 10^3 y 10^4 , sobre las cuales se llevaron a cabo los promedios. Para dicho número de realizaciones, cada corrida del programa da entre 10^{10} y 10^{11} ciclos. Esto implica aproximadamente 4 días de proceso en un procesador Alfa de 700 MHz.

El comportamiento a tiempos largos es independiente de la condición inicial, por lo que se estableció $x(0) = 0$ en todos los cálculos.

Se utilizó un generador de números pseudo-aleatorios estándar [34, 35], (ver Apéndice D). Cada uno de los ruidos del problema tiene su propia subrutina con un generador independiente de números aleatorios con distribución gaussiana centrada en cero.

Se calculó la posición promedio sobre todas las realizaciones cada 10^3 pasos de Δt , además de la correspondiente desviación cuadrática media. Adicionalmente, y con el fin de comparar más adelante las soluciones numéricas con las ecuaciones de evolución de los promedios obtenidas a partir de la ecuación de Fokker-Planck, (3.71)-(3.78), se calcularon todos los promedios involucrados en dichas ecuaciones.

Ecuación de Langevin discretizada

Para la discretización de la ecuación de Langevin (3.38), se utilizó la definición de la derivada discreta (3.89), y se discretizó el tiempo con $t = n\Delta t$, donde $n = 0, 1, 2, 3, \dots$. Por lo tanto, la diferencial de tiempo se define como $dt = \Delta t$. Debido a que la delta de Dirac tiene unidades de inverso de tiempo, las funciones de ruido, $\zeta(t)$ y $\xi(t)$, se pueden escribir de manera discreta como

$$\zeta(n\Delta t) = \frac{f_o}{\tau_e \sqrt{\Delta t}} \zeta_n, \quad (3.90)$$

y

$$\xi(n\Delta t) = \frac{1}{\sqrt{\Delta t}} \xi_n, \quad (3.91)$$

respectivamente (ver ecs.(3.29) y (3.18)). Las cantidades ζ_n y ξ_n son adimensionales y se obtienen directamente de los generadores de números aleatorios. Por lo tanto, el término correspondiente a la fuerza externa discretizada toma la forma siguiente (ver ec.(3.32))

$$F_e(n\Delta t) = \frac{f_o \sqrt{\Delta t}}{\tau_e} \sum_{m=0}^{n-1} \zeta_m e^{-\frac{(n-m)\Delta t}{\tau_e}}, \quad (3.92)$$

mientras que la fuerza térmica en su versión discretizada es (ver ec.(3.17))

$$f_s((n)\Delta t) = \sqrt{\frac{2\gamma kT}{\Delta t}} \xi_n. \quad (3.93)$$

A continuación, substituyendo las ecs.(3.89), (3.92) y (3.93) en la ecuación de Langevin, ec.(3.38), y después de multiplicar por Δt , se llega a que la relación de recurrencia para la posición de la partícula browniana al tiempo $n\Delta t$, como función de la posición al tiempo $(n-1)\Delta t$, está dada por

$$\begin{aligned} x(n\Delta t) &= x((n-1)\Delta t) - \frac{\Delta t}{\gamma} V'(x) + \sqrt{\frac{2kT\Delta t}{\gamma}} \xi_n \\ &+ \frac{f_o \Delta t^{\frac{3}{2}}}{\gamma \tau_e} \sum_{m=0}^{n-1} \zeta_m e^{-\frac{(n-m)\Delta t}{\tau_e}}. \end{aligned} \quad (3.94)$$

Adimensionalización

En la ec.(3.94) aparecen 4 parámetros, a saber: γ y kT , correspondientes al fluido, y f_o y τ_e de la fuerza externa. Sin embargo, están de manera implícita los parámetros λ y V_o correspondientes al potencial conservativo (3.26), por lo que en total el sistema tiene 6 parámetros independientes. La masa de la partícula, m , no aparece debido a que se ha despreciado el término inercial (régimen sobreamortiguado). Sin pérdida de generalidad, se define $m = 1$, por lo que el coeficiente de fricción por unidad de masa, γ , tiene unidades de inverso de tiempo y se utilizan $\tau = \frac{1}{\gamma}$ y λ como las unidades de tiempo y longitud para adimensionalizar la ecuación. Dada esta elección, se expresan los otros cuatro parámetros, así como el resto de las cantidades en la ecuación, en unidades adimensionales. Esto es: $\tilde{x} = \frac{x}{\lambda}$, $\tilde{\Delta t} = \frac{\Delta t}{\tau}$, $\tilde{\tau}_e = \frac{\tau_e}{\tau}$, $\tilde{kT} = \frac{kT\tau^2}{\lambda^2}$, $\tilde{V}_o = \frac{V_o\tau^2}{\lambda^2}$ y $\tilde{f}_o = \frac{f_o\tau^{3/2}}{\lambda}$. Dividiendo la ecuación de Langevin discretizada (3.94) entre λ y escribiéndola en función de las cantidades adimensionales se llega a que

$$\begin{aligned} x(n\Delta t) &= x((n-1)\Delta t) - V_o \Delta t K(x) + \sqrt{2kT\Delta t} \xi_n \\ &+ \frac{f_o \Delta t^{\frac{3}{2}}}{\tau_e} \sum_{m=0}^{n-1} \zeta_m e^{-\frac{(n-m)\Delta t}{\tau_e}}. \end{aligned} \quad (3.95)$$

donde se han omitido los símbolos “tilde” en el entendido de que todas las cantidades están escritas en unidades adimensionales. Se ha hecho la substitución $V'(x) = V_o K(x)$ con el objetivo que todos los parámetros del sistema aparezcan explícitamente en la ecuación. De

la expresión del potencial tipo matraca, ec.(3.26), se obtiene que

$$K(x) = -2\pi \left[\cos(2\pi x) + \frac{4}{5} \cos(4\pi x) + \frac{3}{5} \cos(6\pi x) \right]. \quad (3.96)$$

Se observa que el último término del lado derecho de la ec.(3.95), que corresponde a la fuerza externa, resulta ser una suma. Esto tiene como consecuencia en el algoritmo un ciclo iterativo extra anidado dentro del resto de los ciclos, que consume recursos y tiempo. Con el fin de evitar esta suma y hacer más eficiente y rápido al algoritmo, se busca una expresión para la fuerza externa en forma recursiva, es decir, una expresión de la fuerza al tiempo $t + \Delta t$ en términos de la misma al tiempo t , de igual manera que en la ref.[11]. Para ello se escribe la ecuación correspondiente a la fuerza externa en su forma continua, ec.(3.32), al tiempo $t + \Delta t$, es decir,

$$F_e(t + \Delta t) = \int_{-\infty}^{t+\Delta t} e^{-\frac{(t+\Delta t-s)}{\tau_e}} \zeta(s) ds. \quad (3.97)$$

Al separar la integral se obtiene

$$F_e(t + \Delta t) = F_e(t) e^{-\frac{\Delta t}{\tau_e}} + \int_t^{t+\Delta t} e^{-\frac{(t+\Delta t-s)}{\tau_e}} \zeta(s) ds. \quad (3.98)$$

Si se hace la aproximación de que el ruido $\zeta(s) = \zeta(t)$ toma un valor único durante el intervalo de tiempo entre t y $t + \Delta t$, y se resuelve la integral, se llega a que

$$F_e(t + \Delta t) = F_e(t) e^{-\frac{\Delta t}{\tau_e}} + \tau_e \zeta(t) \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_e}} \right). \quad (3.99)$$

Entonces, el último término de la ec.(3.95) puede ser substituido por la versión discretizada y adimensionalizada de ec.(3.99)

$$F_e((n+1)\Delta t) = F_e(n\Delta t) e^{-\frac{\Delta t}{\tau_e}} + f_o \sqrt{\Delta t} \zeta_n \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_e}} \right). \quad (3.100)$$

Esta expresión está en función del valor de la fuerza en el paso inmediato anterior, por lo que sólo puede ser usada a partir del segundo ciclo. Para propósitos del cálculo numérico se hará la aproximación de que para el primer ciclo $F_e(0) = 0$, ya que se esto no afecta el comportamiento a tiempos largos, donde interesa estudiar el sistema.

Finalmente, la ecuación de Langevin discretizada y adimensionalizada con la que se trabajará para encontrar soluciones numéricas es

$$\begin{aligned} x(n\Delta t) &= x((n-1)\Delta t) - V_o \Delta t K(x) + \sqrt{2kT \Delta t} \xi_n \\ &+ F_e((n-1)\Delta t) e^{-\frac{\Delta t}{\tau_e}} + f_o \sqrt{\Delta t} \zeta_n \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_e}} \right). \end{aligned} \quad (3.101)$$

Una vez realizada la adimensionalización se aprecia que el número de parámetros independientes se ha reducido de 6 a 4, siendo estos: V_o la amplitud del potencial matraca, kT la temperatura del baño térmico, f_o relacionado con la magnitud de la fuerza externa y τ_e su tiempo de correlación. Se dice que f_o está relacionado con la magnitud de la fuerza externa debido a que en realidad la magnitud está dada por $F_o = \frac{f_o}{\sqrt{2\tau_e}}$. Así, los parámetros adimensionales que regulan el comportamiento del sistema son: V_o , kT , F_o y τ_e .

8.2 Resultados y su análisis

A continuación se presentan y discuten los resultados obtenidos para diferentes valores de los cuatro parámetros arriba mencionados. En particular se hace énfasis en los resultados de los casos límite. Con esto último se verifica que las soluciones encontradas con el método numérico sean congruentes con los resultados encontrados en las secciones previas.

(a) Comportamiento en ausencia de fuerza externa

En primer lugar, se muestra en la Figura 3.2 la gráfica de la posición respecto al tiempo de 10 realizaciones de una partícula en un potencial asimétrico en ausencia de la fuerza externa aleatoria correlacionada. Se aprecia un movimiento aleatorio en el que la partícula tiende

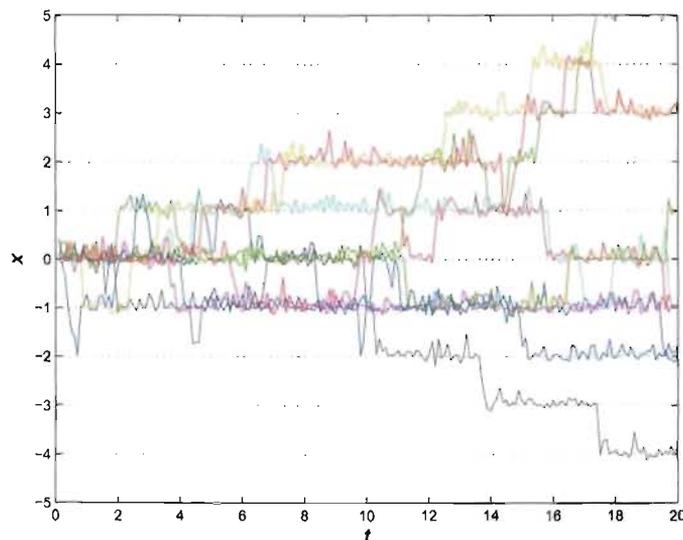


Figura 3.2: Posición de la partícula para 10 diferentes realizaciones, sin fuerza externa y con $kT = 1.0$, $V_o = 2.0$ y $F_o = 0$.

a permanecer en los pozos de potencial, cuyos mínimos se ubican en $x = \dots, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, \dots$, y salta con frecuencia de pozo a pozo. En apariencia, estos saltos ocurren con la misma probabilidad en ambas direcciones del eje x . Ninguna de las trayectorias parece tener una tendencia clara en ninguno de los sentidos, a pesar de tener un potencial asimétrico.

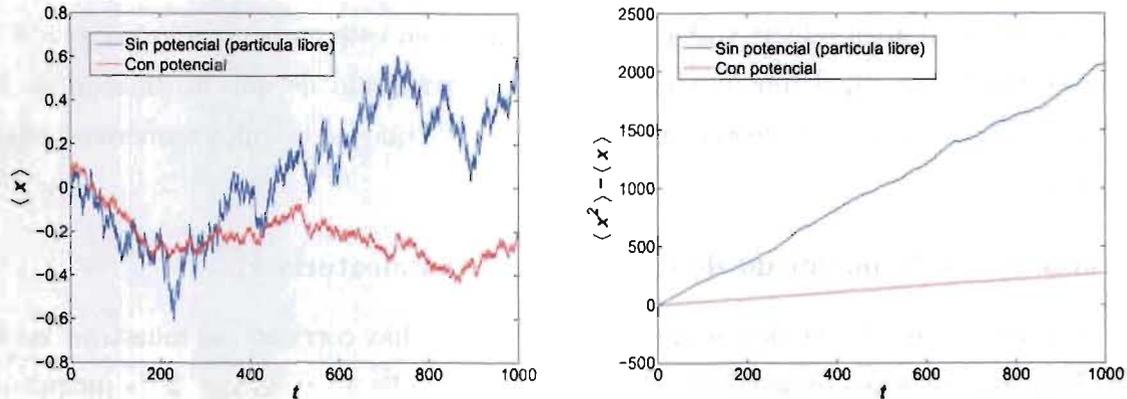


Figura 3.3: Desplazamiento medio y desviación cuadrática media para 2×10^3 realizaciones de una partícula en ausencia de fuerza externa, $F_o = 0$, para el caso en que no hay potencial (partícula libre), $V_o = 0$, y para el caso con potencial distinto de cero, $V_o = 2.0$. En ambos casos con $kT = 1.0$.

A continuación, en la Figura 3.3, se muestra el desplazamiento medio, $\langle x \rangle$, de 2×10^3 realizaciones y la desviación cuadrática media, $\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$, del mismo caso, así como para el caso de la partícula libre sin potencial ($V_o = 0$). Se observa que el desplazamiento medio o la posición promedio permanece dentro del pozo centrado en el origen cero en ambos casos, las dos trayectorias se encuentran muy cerca del eje $x = 0$. En ninguno de los casos se presenta corriente.

Por otro lado, también en la Figura 3.3, se observa que la desviación cuadrática media en ambos casos crece linealmente conforme transcurre el tiempo, mostrando que la difusión es producida por el baño térmico. En el caso de la partícula libre, el coeficiente de difusión es $D \approx 1$. Este resultado coincide con la teoría, ya que $D = \frac{kT}{\gamma} = 1$. El hecho de que en este caso la gráfica correspondiente no sea una recta, se debe a que en la difusión libre las fluctuaciones en la posición son grandes y se requiere un mayor número de realizaciones para tener una mejor estadística. En el caso en el que sí hay potencial, la difusión efectiva es $D_{ef} \approx 0.138$, es decir, cerca de un orden de magnitud menor al caso de la difusión libre.

Esto se explica porque a la partícula se le dificulta desplazarse cuando para ello es necesario superar los pozos del potencial.

Se concluye que en ausencia de fuerza externa dependiente del tiempo no hay corriente, esto incluso cuando se tiene un potencial asimétrico. Esto está de acuerdo con la Segunda Ley de la Termodinámica, ya que al no haber una fuerza externa dependiente del tiempo, no hay elementos que rompan el equilibrio termodinámico del sistema y proporcionen la energía necesaria para producir trabajo. El potencial en este caso no sólo no ayuda a generar corriente, sino que dificulta la difusión. El resultado de que la difusión de la partícula libre coincida con la teoría sustenta el hecho de que los cálculos numéricos están bien realizados.

(b) Variación en la magnitud de la fuerza externa aleatoria F_o

Una vez corroborado el hecho de que sin fuerza externa no hay corriente, se muestran, en la Figura 3.4, las posiciones promedio de la partícula para diferentes valores de la magnitud de la fuerza externa aleatoria, F_o , manteniendo fijo su tiempo de correlación en $\tau_e = 0.03$, así como la temperatura del baño en $kT = 1.0$ y la amplitud del potencial asimétrico en $V_o = 2.0$. Se puede apreciar cómo, al añadir la fuerza externa, la posición promedio de

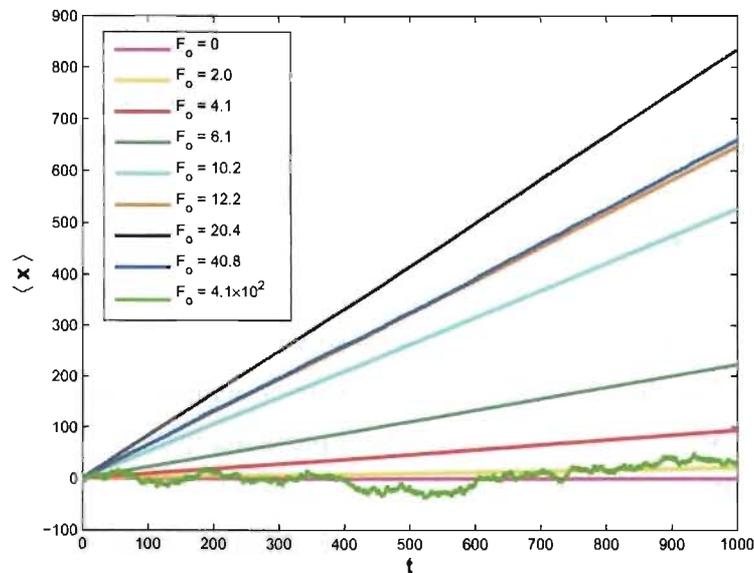


Figura 3.4: Posición promedio de 2×10^3 realizaciones de la partícula para diferentes valores de F_o con $V_o = 2.0$, $kT = 1.0$ y $\tau_e = 0.03$.

la partícula cambia de manera lineal en la dirección positiva de x , es decir, se produce una corriente neta con velocidad promedio constante igual a la pendiente de cada recta. Se corrobora que esta fuerza rompe el equilibrio termodinámico del sistema y produce corriente. Resulta interesante el hecho de que la corriente corresponda a una velocidad constante, es decir, el sistema haya alcanzado un régimen de corriente estacionaria. Esto mismo se observó en todos los casos estudiados en los que se halló corriente.

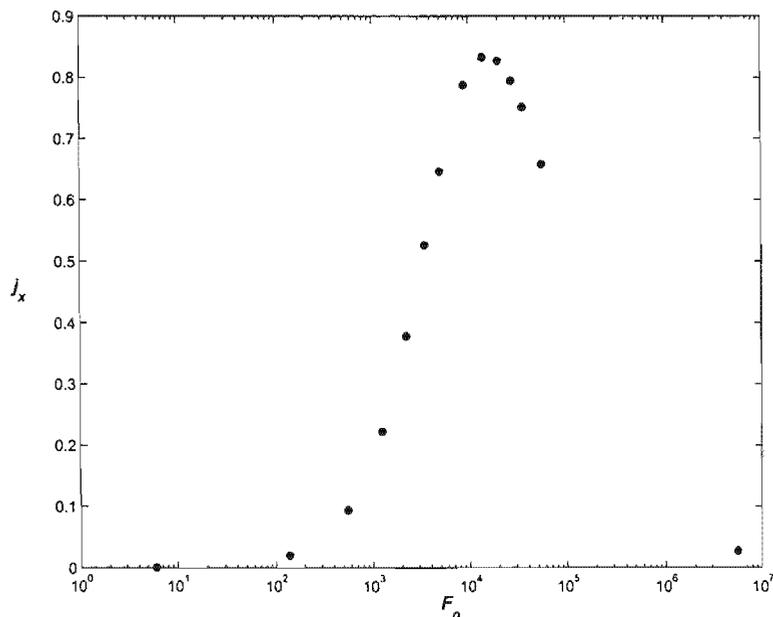


Figura 3.5: Corriente en función de F_o con $V_o = 2.0$, $kT = 1.0$ y $\tau_e = 0.03$.

En la Figura 3.4 se han incluido los desplazamientos medios de la partícula para valores de la magnitud de la fuerza externa que van desde $F_o = 0$ hasta $F_o = 4.1 \times 10^2$. Se calculó también la corriente a partir de la definición ya discutida, ec.(3.86), para los mismos valores de la fuerza externa. La gráfica de la corriente en función de F_o se muestra en la Figura 3.5.

En ambas gráficas se observa que, conforme se incrementa el valor de F_o , la corriente aumenta hasta llegar a una corriente máxima en $F_o = 20.4$. A partir de este valor la corriente comienza a disminuir, hasta que para $F_o > 4.1 \times 10^2$ la corriente desaparece. Esto último se debe a que la magnitud de la fuerza externa es muy grande en comparación con el resto de las fuerzas, en particular respecto a aquella debida al potencial, de modo que, tanto la asimetría como el resto de los elementos del sistema dejan de jugar un papel

relevante. En todos los casos, la dirección en la que la partícula se desplaza es en la que los pozos del potencial tienen menor pendiente (ver Figura 3.1), es decir, no se presenta inversión de corriente.

Se tiene entonces que una partícula browniana sobreamortiguada, sometida a una fuerza térmica descorrelacionada, a un potencial periódico asimétrico y a una fuerza externa aleatoria y correlacionada, presenta corriente. Dependiendo de los valores de los parámetros, la eficiencia de la corriente varía considerablemente hasta el grado de desaparecer.

(c) Variación en el tiempo de correlación de la fuerza externa, τ_e

En la Figura 3.6 se presenta el comportamiento de la partícula browniana, a través de la corriente j_x , en función del tiempo de correlación de la fuerza externa, τ_e . Se ha graficado la corriente contra el logaritmo natural del tiempo de correlación de la fuerza externa, $\ln \tau_e$, con el propósito de que se aprecie más claramente la dependencia con τ_e . Se han incluido también barras de error a cada uno de los puntos. Las barras de error están relacionadas con el tamaño de las fluctuaciones en el promedio de la posición, $\langle x \rangle$. Cabe señalar que

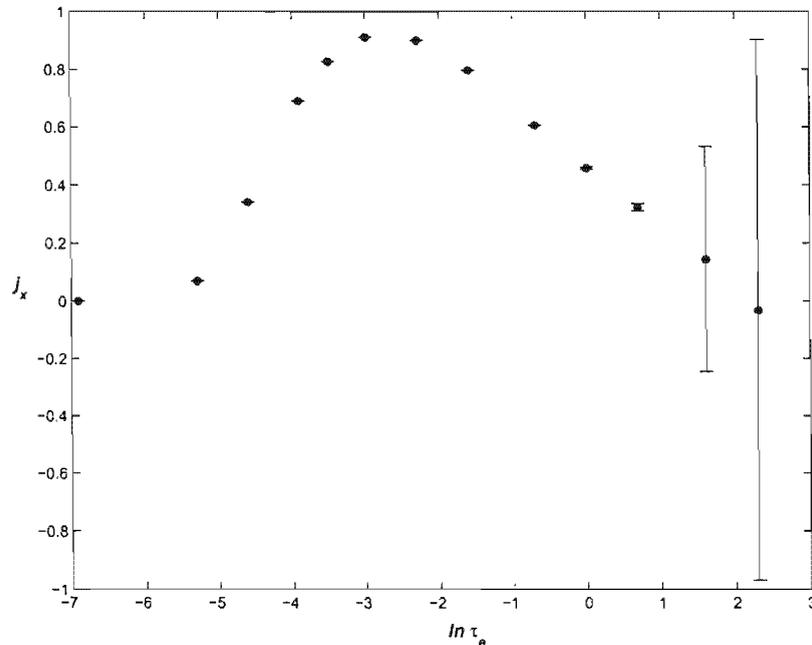


Figura 3.6: Corriente en función del $\ln \tau_e$ con $F_o = 20.4$, $V_o = 2.0$ y $kT = 1.0$.

el intervalo de valores seleccionado para τ_e cumple con las restricciones establecidas. Se aprecia en la gráfica que, partiendo de $\tau_e = 0.001$, la corriente se incrementa conforme τ_e crece, hasta llegar a un valor máximo en $\tau_e \approx 0.05$, a partir de donde comienza a disminuir hasta incluso hacerse negativa para valores grandes de τ_e . Sin embargo, para los valores de τ_e donde la corriente en promedio parece ser negativa el error encontrado es muy grande, como se observa en la gráfica. Para $\tau_e \geq 5$ las fluctuaciones se incrementan de tal forma que resulta imposible asegurar algo respecto al comportamiento del sistema, en particular respecto a la existencia de inversión de corriente.

Por otra parte, se estudió el caso en el que la fuerza externa está descorrelacionada, es decir, que se trata de un ruido blanco. Bajo estas circunstancias se encontró que no hay corriente. Este resultado obedece a que el tiempo de correlación de esta fuerza y el tiempo de correlación del ruido térmico coinciden (ambas fuerzas son delta correlacionadas), de modo que la presencia de esta fuerza, como se ha demostrado en la sección 4, es equivalente a incrementar la intensidad del ruido térmico. Entonces, se corrobora la necesidad de que la fuerza externa aleatoria esté correlacionada para que exista corriente.

(d) Variación de la temperatura del baño térmico kT

En la Figura 3.7 se muestra la gráfica de la corriente conforme se varía la intensidad de la fuerza térmica, es decir, la temperatura del baño térmico, mientras el resto de los parámetros permanecen constantes. De igual manera que con el resto de los parámetros, se observa aquí que conforme se aumenta la temperatura, la corriente se incrementa hasta llegar a un valor máximo cuando $kT \approx 0.3$. A partir de ahí, la corriente comienza a disminuir, aproximándose a cero de manera asintótica, hasta el caso extremo cuando $kT \geq 100$, donde la corriente es nula. Este comportamiento se debe a que cuando la temperatura es muy alta, la fuerza térmica domina respecto al resto de las fuerzas, de la misma manera que lo hace la fuerza externa para F_o grandes. El caso en que $kT \geq 100$, la fuerza térmica domina por completo, siendo V_o despreciable, por lo que se tiene un comportamiento equivalente al de una una partícula libre.

Resulta interesante señalar que cuando $kT = 0$, la corriente no sólo no es cero, sino que además toma un valor cercano al máximo. Adicionalmente, se ha encontrado que para valores grandes de F_o , a partir de $F_o = 30$, la corriente es máxima precisamente en $kT = 0$. Dichos resultados indican que es posible prescindir del término correspondiente a la fuerza

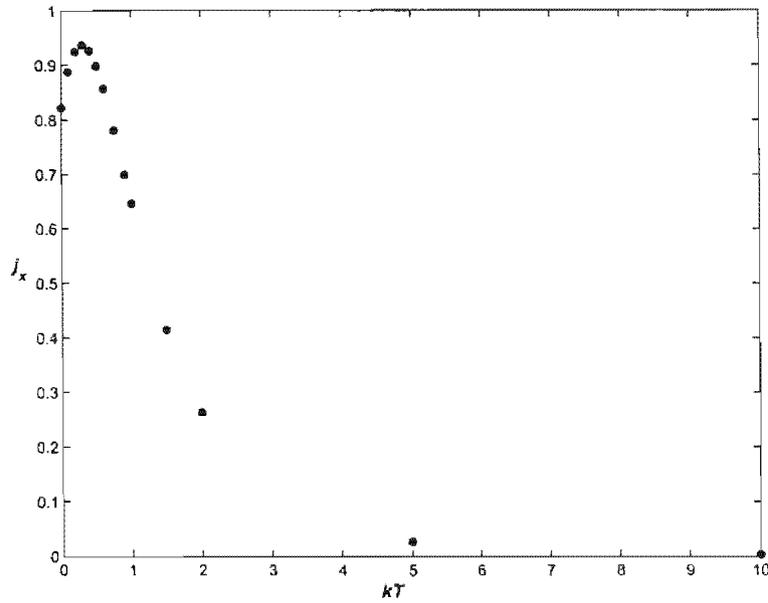


Figura 3.7: Corriente en función de kT con $V_o = 2.0$, $F_o = 3.5 \times 10^3$ y $\tau_e = 0.03$.

térmica en la ecuación de Langevin (3.38) y aún así encontrar corriente. Es importante mencionar que esto no implica que no existe baño térmico ya que el término disipativo, que también tiene su origen en el baño, sigue estando presente. Este es un caso hipotético debido a que no es posible tener una temperatura igual a cero. No obstante, puede ser interpretado como el límite cuando la fuerza térmica es despreciable respecto al resto de las fuerzas, es decir, un sistema a mayor escala o un sistema macroscópico. Por lo tanto, este resultado muestra la posibilidad de encontrar este fenómeno de transporte en sistemas macroscópicos.

Es importante mencionar que este caso no corresponde al conocido como “matracas deterministas inerciales”, refs.[14, 36], ya que en dicho fenómeno se requiere de inercia y no hay presencia de procesos estocásticos.

(e) Comportamiento cuando el potencial es simétrico

Finalmente, se estudió el comportamiento del sistema cuando el potencial periódico es simétrico. Se consideró para este propósito un potencial con la siguiente forma

$$V(x) = -V_o \left[\sin \left(2\pi \frac{x}{\lambda} \right) \right], \quad (3.102)$$

con $V_o = 2.0$. El resto de los parámetros se variaron usando los mismos valores antes vistos para el potencial asimétrico. En todos los casos se encontró que no hay corriente. Con esto se confirmó que, la presencia de un mecanismo que rompa la simetría del sistema, en este caso introducido a través del potencial, resulta esencial para que se dé el fenómeno de la corriente.

Difusión

De los análisis realizados, la mayor corriente hallada fue de $j_x \approx 1.77$, para los valores de los parámetros $V_o = 2.0$, $kT = 1.0$, $F_o = 20.4$, $\tau_e = 0.03$. Esta corriente corresponde a un desplazamiento medio de la partícula browniana de aproximadamente 1770 pozos en el intervalo de tiempo de $t = 0$ hasta $t = 10^3$. En la Figura 3.8 se muestra la desviación cuadrática media para el caso mencionado, así como para el caso de la partícula libre ($V_o = 0$ y $F_o = 0$). Se observa que en ambos casos la desviación cuadrática media crece el

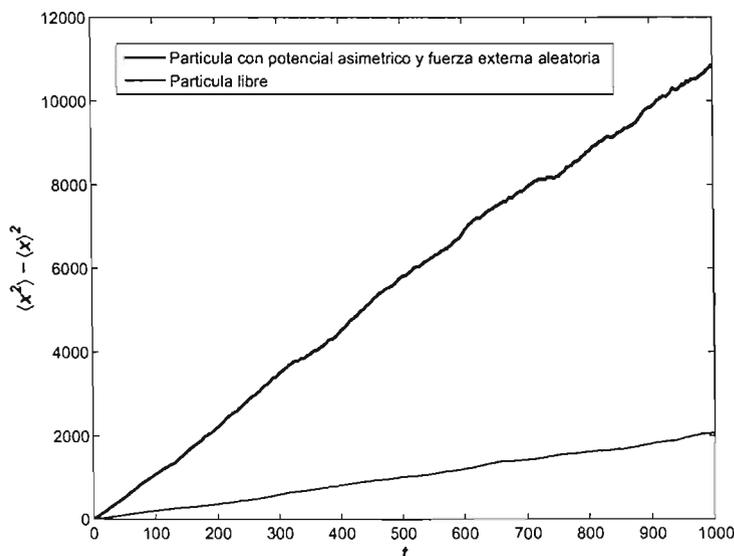


Figura 3.8: Desviación cuadrática media para el caso en que hay potencial asimétrico y fuerza externa aleatoria ($V_o = 2.0$, $kT = 1.0$, $F_o = 20.4$ y $\tau_e = 0.03$), y para el caso de una partícula libre ($V_o = 0$, $F_o = 0$ y $kT = 1.0$).

linealmente con t . No obstante, la difusión efectiva resulta mucho mayor para el caso en que existe corriente, donde $D_{ef} \approx 5.5$, mientras que el coeficiente de difusión de la partícula libre es $D \approx 1$.

Resumen de resultados del análisis numérico

En primer lugar, se ha encontrado que una partícula browniana en un baño térmico y sujeta a un potencial periódico asimétrico no presenta corriente. Esto está de acuerdo con la Segunda Ley de la Termodinámica.

Por otro lado, la partícula no presenta corriente si se agrega una fuerza externa aleatoria descorrelacionada. Esto se debe a que la presencia de dicha fuerza es equivalente a incrementar la intensidad del ruido térmico en el caso anterior.

En contraste, cuando la fuerza externa que se añade está correlacionada, se rompe el equilibrio termodinámico y se produce corriente. Las gráficas de la corriente en función de los parámetros F_o , τ_e y kT alcanzan un máximo en los tres casos. Al alejarse de ese máximo, la corriente tiende a cero.

Sin embargo, la corriente no desaparece cuando $kT = 0$, e incluso en algunos casos la máxima corriente se da precisamente en $kT = 0$. Esto indica que la fuerza térmica del baño no es necesaria para que exista corriente y, por lo tanto, que es posible que el fenómeno de transporte ocurra en sistemas macroscópicos, donde las fluctuaciones térmicas no son relevantes.

En todos los casos en que se presentó corriente, se halló que a tiempos largos la velocidad de la partícula browniana llega a un régimen de velocidad constante. Asimismo, la dirección de dicha velocidad fue en todos los casos en la dirección positiva del eje x , en la que los pozos del potencial tienen menor pendiente. En ningún caso se observó inversión de corriente.

Se encontró que no existe corriente cuando el potencial es simétrico, coincidiendo con el resultado teórico de la sección 7.

La mayor corriente encontrada fue $j_x \approx 1.77$, para $V_o = 2.0$, $kT = 1.0$, $F_o = 20.4$ y $\tau_e = 0.03$. Esto es, un desplazamiento medio de la partícula browniana de aproximadamente 1770 pozos en el intervalo de tiempo de $t = 0$ hasta $t = 10^3$. En dicho caso, se halló un coeficiente de difusión efectiva de $D_{ef} \approx 5.5$. mientras que el coeficiente de difusión correspondiente a la partícula libre fue de $D \approx 1$.

9 Análisis comparativo de resultados numéricos

9.1 Comparación con ecuaciones de evolución

Como se mencionó anteriormente, el algoritmo para encontrar soluciones a la ecuación de Langevin (3.38), calcula todos los promedios involucrados en las ecuaciones de evolución (ecs.(3.71)-(3.78)). En la presente sección, se emplean dichos resultados numéricos para comprobar si su comportamiento obedece a las mencionadas ecuaciones de evolución, deducidas a partir de la ecuación de Fokker-Planck (3.57). A través de esta comparación se busca mostrar la equivalencia entre ecuación de Langevin y la de Fokker-Planck, así como la confiabilidad de los resultados numéricos.

Para llevar a cabo este análisis comparativo, se evalúan ambos lados de las ecuaciones de evolución. Esto se realiza mediante el cálculo explícito de sus términos, utilizando para ello resultados numéricos de los promedios. Dichos resultados son funciones aleatorias dependientes del tiempo, por lo tanto, los lados de dichas ecuaciones estarán representados también por funciones aleatorias dependientes del tiempo. Entonces, se grafican estas funciones y a cada una se le hace un ajuste por mínimos cuadrados, a través del cual se realiza la comparación.

A continuación se presenta el análisis correspondiente a algunas de las ecuaciones de evolución.

Se comienza con la ecuación de evolución para el promedio de la posición de la partícula, ec.(3.71), es decir, la correspondiente a la corriente, que una vez adimensionalizada toma la forma

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = -\langle V'(x) \rangle. \quad (3.103)$$

En la Figura 3.9 se muestran graficados los valores numéricos calculados de $\frac{d\langle x \rangle}{dt}$ y de $-\langle V'(x) \rangle$, como funciones del tiempo. De acuerdo con la ecuación de evolución (3.103), estas dos cantidades deben coincidir. Se observa que ambas corresponden a fluctuaciones alrededor de valores constantes, similares en apariencia. Se ajustaron entonces rectas por mínimos cuadrados a ambas cantidades y se halló que éstas coinciden, al grado que en la gráfica a mayor escala de la Figura 3.9, prácticamente se aprecia sólo una recta. Del ajuste por mínimos cuadrados se obtiene que ambas rectas tienen una pendiente igual a cero y sus ordenadas al origen son: ≈ 0.3359 para $\frac{d\langle x \rangle}{dt}$ y ≈ 0.3382 para $\langle V'(x) \rangle$. Por lo tanto, los valores numéricos hallados cumplen con la predicción de la ec.(3.103) con una precisión

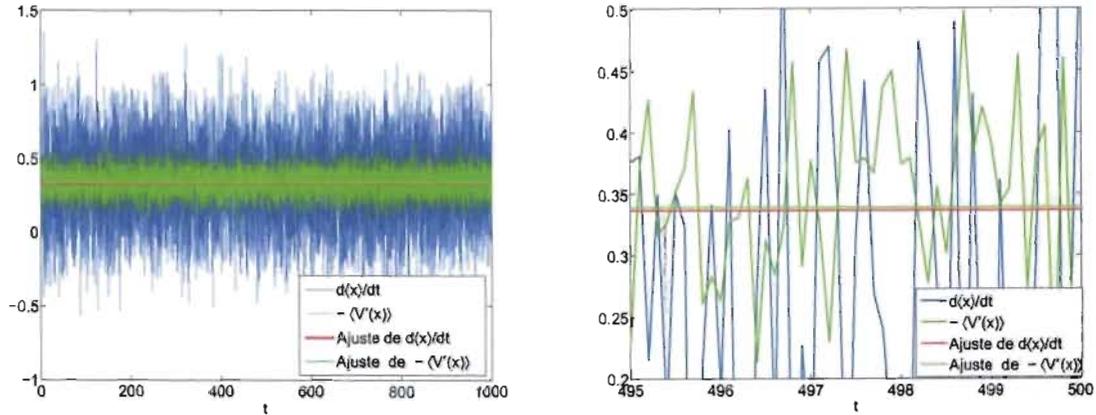


Figura 3.9: Gráficas a diferentes escalas de las cantidades $\frac{d\langle x \rangle}{dt}$ y $-\langle V'(x) \rangle$, con sus correspondientes ajustes por mínimos cuadrados.

notable.

La siguiente comparación corresponde a la ecuación de evolución para el promedio del cuadrado de la posición, $\langle x^2 \rangle$, cuya forma adimensionalizada es

$$\frac{d\langle x^2 \rangle}{dt} = 2\langle xF_e \rangle + 2\langle xV'(x) \rangle + 2kT. \quad (3.104)$$

En la Figura 3.10 se muestran graficados; por una parte $\frac{d\langle x^2 \rangle}{dt}$, y por otra la suma de las

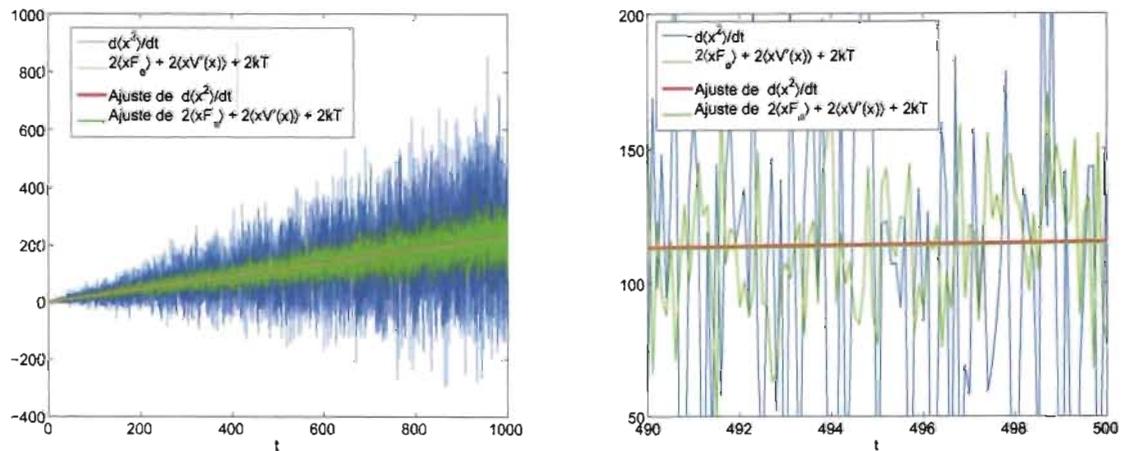


Figura 3.10: Gráficas a diferentes escalas de las cantidades $\frac{d\langle x^2 \rangle}{dt}$ y $2\langle xF_e \rangle + 2\langle xV'(x) \rangle + 2kT$ con sus correspondientes ajustes por mínimos cuadrados.

cantidades del lado derecho de la ec.(3.104). Conforme a ésta última, ambas cantidades

graficadas deben ser iguales. Se observa que ambas cantidades corresponden a fluctuaciones cuya amplitud aumenta conforme transcurre el tiempo. También se aprecia que los valores alrededor de los cuales se presentan estas fluctuaciones son aparentemente los mismos, además de tener un crecimiento lineal. Se ajustan rectas por mínimos cuadrados y de nuevo se observa que dichas rectas coinciden. Las ecuaciones de estas rectas son

$$\frac{d\langle x^2 \rangle}{dt} \approx 0.230t + 1.35, \quad (3.105)$$

y

$$2\langle xF_e \rangle + 2\langle xV'(x) \rangle + 2kT \approx 0.228t + 1.55. \quad (3.106)$$

Tanto la pendiente como la ordenada al origen son muy similares, se puede afirmar que existe una coincidencia muy buena entre ambas cantidades. Una vez más, los valores obtenidos numéricamente obedecen a la ecuación de evolución.

Se llevó a cabo el mismo procedimiento con el resto de las ecuaciones de evolución y, en todos los casos, se encontró que los resultados numéricos obedecen las ecuaciones de evolución de los promedios.

Los resultados encontrados aquí son importantes ya que corroboran la equivalencia entre la ecuación de Langevin y la de Fokker-Planck, y dan sustento teórico a los resultados numéricos. En particular, se tiene la seguridad de que la discretización usada es válida. Se puede entonces tener la certeza de que las conclusiones deducidas del análisis numéricos son confiables.

9.2 Análisis de la fuerza del potencial tipo matraca

En la Figura 3.11, se muestran tres casos particulares de los valores de la fuerza promedio debida al potencial, $\langle V'(x) \rangle$, obtenidos numéricamente. En (A) y (B) se muestran respectivamente el caso en que la fuerza externa está descorrelacionada y el caso en el que el potencial es simétrico. En (C) se muestra el caso en que se tiene una fuerza externa aleatoria correlacionada y un potencial asimétrico. Para analizar estas cantidades, de nuevo se ajustan rectas por mínimos cuadrados a cada uno de los tres casos.

Se observa que en (A) y (B), donde se sabe que no hay corriente, la cantidad $\langle V'(x) \rangle$ fluctúa alrededor de la recta horizontal que se superpone al eje del tiempo. Mientras que en (C), donde se ha observado que hay corriente, $\langle V'(x) \rangle$ fluctúa alrededor de una recta de pendiente cero cuya ordenada al origen coincide con el negativo de la magnitud de la

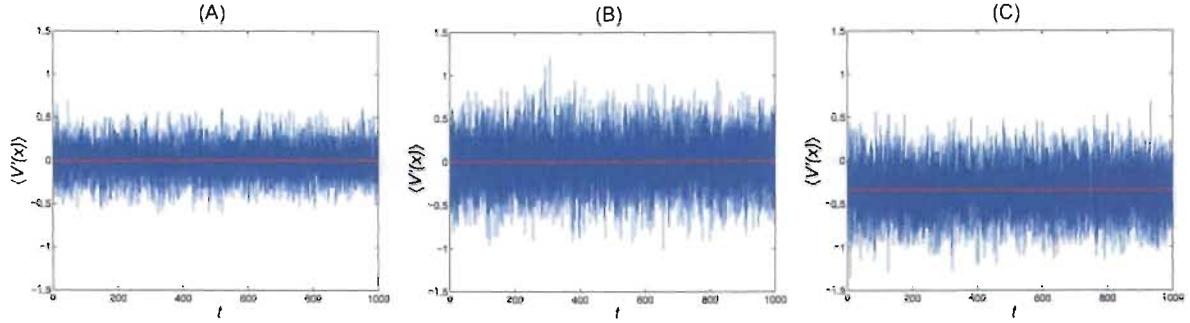


Figura 3.11: Comparación de resultados numéricos de la fuerza promedio debida al potencial, $\langle V'(x) \rangle$, con: (A) fuerza externa correlacionada y potencial simétrico, (B) fuerza externa descorrelacionada y potencial asimétrico, (C) fuerza externa correlacionada y potencial asimétrico.

corriente. como indica la ec.(3.103). Se verifica, una vez más que la fuerza promedio debida al potencial, $\langle V'(x) \rangle$, es la cantidad que indica cuando existe corriente y la que determina cual es su magnitud.

10 Conclusiones

Se ha introducido un modelo de motor browniano, el cual está basado en la teoría de Langevin del movimiento browniano. Este modelo consiste en una partícula browniana sobreamortiguada (sin inercia), en un baño térmico descorrelacionado (ruido blanco), sujeta a la fuerza debida a un potencial periódico asimétrico y a una fuerza externa aleatoria correlacionada (ruido de color). Se ha planteado la ecuación de Langevin correspondiente a este modelo en una dimensión, ec.(3.38).

Partiendo de la ecuación de Langevin, se ha deducido la ecuación de Fokker-Planck equivalente, ec.(3.57). Mediante estas dos ecuaciones, se llegó a la siguiente expresión para la corriente

$$j_x = \frac{d\langle x \rangle}{dt} = -\frac{1}{\gamma} \left\langle \frac{dV(x)}{dx} \right\rangle. \quad (3.107)$$

Haciendo uso de la ecuación de Fokker-Planck (3.57), se ha demostrado que, si el potencial $V(x)$ es simétrico, no existe corriente. Asimismo, si el sistema llega a un estado estacionario, $\partial_t \mathcal{W}(x, F_e, t) = 0$, los promedios de las variables del sistema son constantes, en particular $\frac{d\langle x \rangle}{dt} = 0$, por lo tanto no hay corriente.

Se ha demostrado que, cuando la fuerza externa dependiente del tiempo es cero, $F_e = 0$,

ó cuando se trata de una fuerza estocástica descorrelacionada (ruido blanco), el sistema se encuentra en equilibrio termodinámico. Por la Segunda Ley de la Termodinámica, en este caso no es posible extraer trabajo del sistema y en consecuencia no puede haber corriente.

También se ha encontrado que, si el potencial $V(x)$ es simétrico y en general no existe un mecanismo que rompa la simetría del sistema, no hay corriente.

Todos estos resultados concuerdan con lo hallado históricamente en una enorme cantidad de trabajos al respecto de este tipo de sistemas, por ejemplo las refs.[4, 5, 12, 33].

Cuando la fuerza externa dependiente del tiempo que se añade está correlacionada (ruido de color) y el potencial es asimétrico, se rompen tanto el equilibrio termodinámico como la simetría del sistema. Por lo tanto, en este caso existe la posibilidad de que se presente corriente.

A continuación, se llevó a cabo un análisis numérico de la ecuación de Langevin variando cada uno de los cuatro parámetros adimensionales del sistema: V_0 la amplitud del potencial, kT la intensidad del baño térmico, F_0 la magnitud de la fuerza externa y τ_e su tiempo de correlación.

En primera instancia se estudiaron los casos límite del problema, a partir de los cuales se corroboraron los resultados obtenidos analíticamente mediante la ecuación de Fokker-Planck. Se mostró que para el caso de un potencial periódico asimétrico y una fuerza externa aleatoria correlacionada, aparece una corriente de velocidad constante. La magnitud de dicha corriente es función de los parámetros adimensionales y en todos los casos alcanza un máximo.

Se halló que la difusión es lineal y para la máxima corriente encontrada, $j_x \approx 1.77$, el coeficiente de difusión efectiva es $D_{ef} \approx 5.5$. En contraste con el caso de la partícula libre, donde el coeficiente de difusión es $D \approx 1$.

Se encontró que la corriente no sólo no desaparece cuando la intensidad del baño térmico es nula, $kT = 0$, sino que incluso en algunos casos corresponde al valor máximo respecto a la correspondiente para valores más grandes de kT . Esto indica que la fuerza térmica del baño es prescindible para que exista corriente. Este último resultado muestra que el fenómeno de la corriente se puede presentar en sistemas macroscópicos, donde las fuerzas térmicas pueden considerarse despreciables. Este resultado ha sido ya encontrado en la ref.[14, 36] pero para el caso inercial y determinista.

En el análisis numérico no se encontró evidencia de corriente negativa, es decir, no se

encontró inversión de corriente. Sin embargo, en trabajos sobre el mismo problema que en el presente trabajo y sin inercia, se ha reportado la existencia de inversión de corriente cuando se utilizan ciertos potenciales particulares refs.[9, 25]. Por otro lado, históricamente se ha encontrado que en este tipo de sistemas, cuando la inercia no es despreciable, aparecen regímenes de inversión de corriente [10, 11, 37].

Por otra parte, partiendo de la ecuación de Fokker-Planck (3.57), se obtuvieron las ecuaciones de evolución para los promedios de las cantidades x , x^2 , F_e , F_e^2 , $V'(x)$, xF_e , $xV'(x)$ y $F_eV'(x)$. A continuación se evaluaron, mediante los resultados del análisis numérico, las cantidades involucradas en dichas ecuaciones. En todos los casos se encontró que los resultados numéricos concuerdan con las ecuaciones evolución de los promedios.

En particular, se encontró que en los casos en que se sabe que no hay corriente, el promedio de la fuerza debida al potencial, $\langle V'(x) \rangle$, fluctúa alrededor de cero. Mientras que en el caso en el hay sí hay corriente, $\langle V'(x) \rangle$ fluctúa alrededor de una recta de pendiente cero, cuya ordenada al origen coincide con el negativo la magnitud de la corriente. Este resultado esta en concordancia con la expresión (3.107) y permite afirmar que el promedio de la fuerza al potencial, $\langle V'(x) \rangle$, es la cantidad que determina la existencia y la magnitud de la corriente en el sistema.

En términos generales, se ha encontrado una equivalencia entre los resultados numéricos y los analíticos. De este modo, se ha corroborado la equivalencia entre la ecuación de Langevin y la de Fokker-Planck hallada, además de la validez de la discretización para el análisis numérico.

Capítulo 4

Modelo bidimensional de una proteína motora sobre un filamento

En este capítulo se presenta un modelo de filamento en dos dimensiones para el mecanismo mediante el cual las proteínas motoras transportan vesículas sobre los microtúbulos. Se plantean las ecuaciones de Langevin correspondientes al problema y se presentan los resultados de resolver dichas ecuaciones numéricamente. Finalmente, se discuten desde diversos puntos de vista los resultados obtenidos.

1 El modelo de filamento

Como se ha mencionado en el Capítulo 2, se sabe que el transporte de vesículas se lleva a cabo por medio de las proteínas motoras que “caminan” sobre los microtúbulos.

Con el propósito de contribuir a la comprensión de la física que yace bajo el comportamiento de estas proteínas motoras, se propone un modelo que es una extensión a dos dimensiones del problema estudiado en el Capítulo 3, con un filamento recto en el plano xy , el cual juega el papel de un protofilamento de los microtúbulos sobre los que se mueven las proteínas motoras. Dicho modelo pretende contribuir al entendimiento sobre los mecanismos de transporte de las proteínas motoras cuando éstas tienen la posibilidad de ligarse y desligarse del microtúbulo, y no sólo cuando se encuentran ligadas a éste, como sucede en los análisis unidimensionales.

Existen modelos unidimensionales, llamados *matracas intermitentes* (*flashing ratchets* en inglés), que pueden ser usados para modelar partículas que tienen la posibilidad de ligarse y desligarse de un filamento [12]. Sin embargo, las *matracas intermitentes* son

limitadas para este propósito, ya que por ejemplo, los estados ligados y desligados son impuestos arbitrariamente mediante la cantidad que regula la intermitencia. En contraste, en el modelo de filamento que aquí se estudia, estos estados se presentan de manera natural.

Para el modelo de filamento se han considerado las siguientes observaciones sobre el comportamiento de estas proteínas motoras:

i) Los tiempos de residencia de las proteínas motoras en un microtúbulo son finitos, de modo que son capaces de desligarse y volverse a ligar en diversas ocasiones a lo largo de su “caminata” [1, 23, 24].

ii) Cierta clase de proteínas motoras llamadas *kinesinas*, mientras se encuentran ligadas a un microtúbulo, se desplazan en línea recta sobre uno de los protofilamentos del microtúbulo, sin entrar en contacto con otros protofilamentos en su recorrido y siempre se mueven en la misma dirección del microtúbulo [1, 21].

Se han realizado a la fecha un gran número de trabajos relacionados con el tema de matracas estocásticas, muchos de los cuales han sido pensados como modelos para proteínas motoras. Sin embargo, la inmensa mayoría de estos trabajos corresponden a modelos en una dimensión. Entre los pocos trabajos que se han encontrado en dos dimensiones resaltan las refs.[15–20, 38, 39]. En los casos de las refs.[38, 39] no se hace uso de la teoría de Langevin del movimiento browniano sino que se establecen probabilidades *ad doc* asimétricas en el espacio, generándose así corrientes de manera arbitraria. En el resto de los casos sí se hace uso de teoría de Langevin del movimiento browniano y se ensayan diferentes potenciales con diversos propósitos. Y sólo en los casos de las refs.[15, 16, 19] se utilizan potenciales que pretenden modelar el comportamiento de una proteína motora desplazándose sobre un microtúbulo. Sin embargo, consideramos que el modelo que se presenta a continuación, resulta más adecuado para describir la dinámica de dichas proteínas.

2 Potencial filamento

Los hechos arriba descritos se han tomado en cuenta para proponer un potencial bidimensional. En este potencial, las fuerzas atractivas entre el protofilamento y la proteína motora se modelan mediante un “canal” o “filamento atractivo” a lo largo del eje x , como se muestra en la Figura 4.1. El interior del filamento está conformado por una estructura periódica y asimétrica, cuyo corte trasversal a lo largo del eje $y = 0$ es igual al potencial tipo matraca estudiado en el Capítulo 3 (ver Figura 4.2). Conforme y varía, el potencial

tiende a cero siguiendo una curva gaussiana invertida de manera simétrica. Se le llamará potencial filamento y está descrito por la función

$$V(x, y) = -e^{-\frac{y^2}{s}} \left[V_1 + V_o \left(\sin \left(\frac{2\pi x}{\lambda} \right) + \frac{4}{10} \sin \left(\frac{4\pi x}{\lambda} \right) + \frac{2}{10} \sin \left(\frac{6\pi x}{\lambda} \right) \right) \right], \quad (4.1)$$

donde V_1 es la profundidad promedio del filamento, s es una medida de su ancho, V_o es la amplitud de la estructura periódica del filamento y λ su periodo.

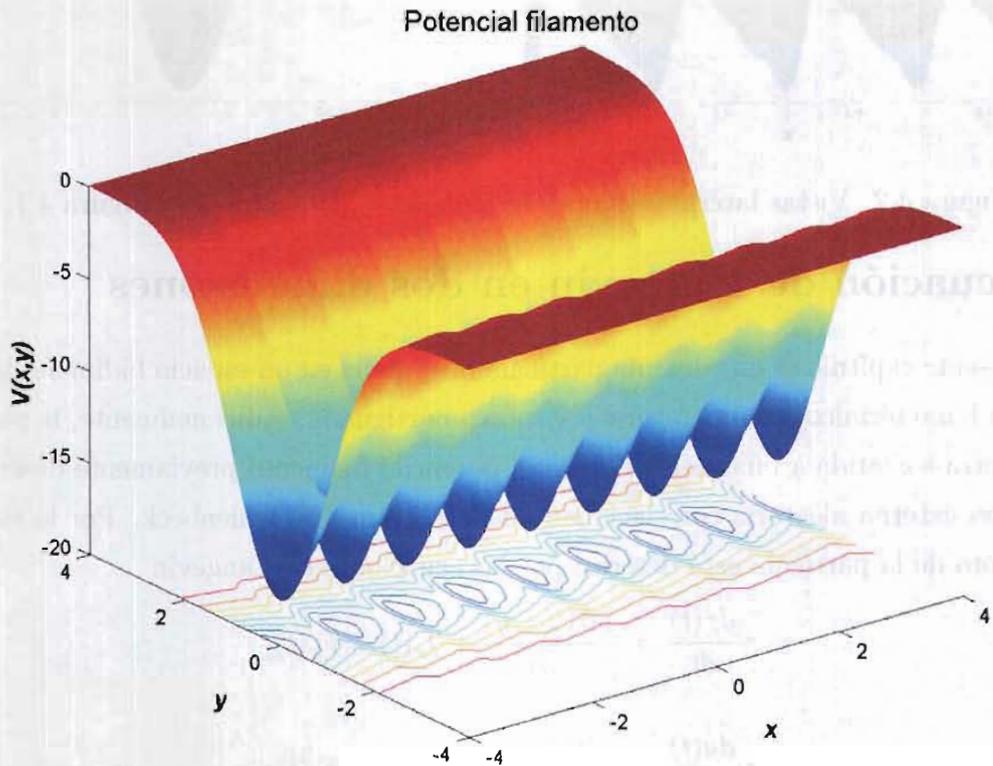


Figura 4.1: Potencial bidimensional con estructura periódica asimétrica a lo largo de un filamento atractivo. En la figura, el filamento tiene una profundidad media de $V_1 = 15$ y un ancho de $s = 2$, mientras que la estructura periódica es de periodo $\lambda = 1$ con una amplitud de $V_o = 2$.

Para el análisis, se considerará que la partícula se encuentra ligada si está en el filamento y desligada si se encuentra fuera del mismo. La profundidad V_1 y el ancho s del filamento están directamente relacionados con la capacidad atractiva de éste y, por lo tanto, con la probabilidad de que las partículas permanezcan ligadas.

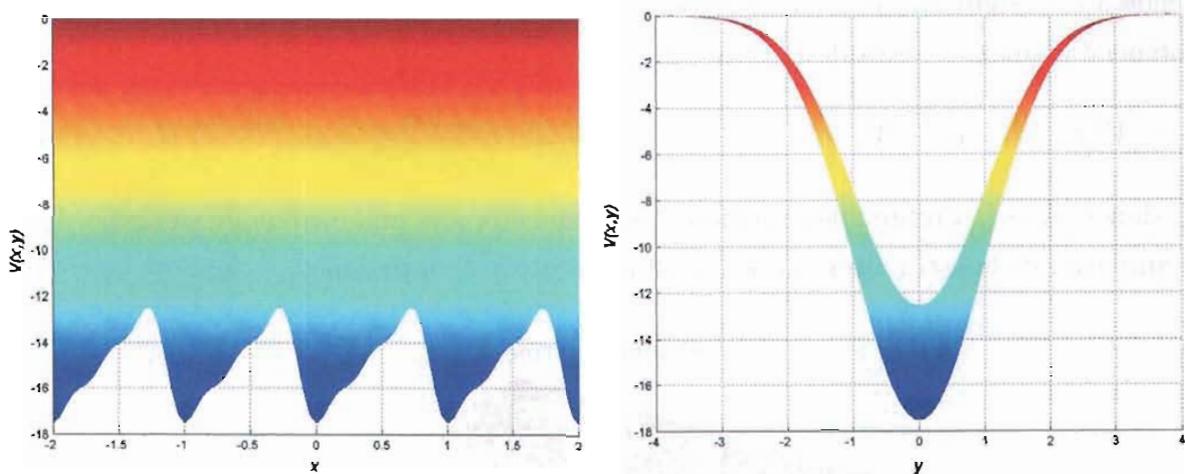


Figura 4.2: Vistas lateral y frontal del potencial filamento en la Figura 4.1.

3 Ecuación de Langevin en dos dimensiones

En el presente capítulo se estudia una partícula browniana en un espacio bidimensional, inmersa en un baño térmico a temperatura T y sobreamortiguada. Adicionalmente, la partícula se encuentra sometida a una fuerza debida al potencial filamento previamente descrito y a una fuerza externa aleatoria correlacionada del tipo Ornstein-Uhlenbeck. Por lo tanto, el movimiento de la partícula está descrito por las ecuaciones de Langevin

$$\gamma \frac{dx(t)}{dt} = -\frac{\partial V(x,y)}{\partial x} + f_x(t) + F_x(t), \quad (4.2)$$

y

$$\gamma \frac{dy(t)}{dt} = -\frac{\partial V(x,y)}{\partial y} + f_y(t) + F_y(t), \quad (4.3)$$

donde γ es el coeficiente de fricción de fluido. La cantidad $f_i(t)$, con $i = x, y$, es la fuerza estocástica y descorrelacionada debida al baño térmico. Esta fuerza térmica es de promedio cero ($\langle f_i(t) \rangle = 0$) y satisface

$$f_i(t) = \sqrt{2\gamma kT} \xi_i(t). \quad (4.4)$$

Aquí, $\xi_i(t)$ representa un ruido blanco gaussiano de promedio cero ($\langle \xi_i(t) \rangle = 0$) y autocorrelación

$$\langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle = \delta(t - t') \cdot \delta_{ij}. \quad (4.5)$$

Del mismo modo que en el Capítulo 3, se define $\langle \cdot \rangle$ como el promedio sobre un conjunto representativo de realizaciones.

La fuerza externa aleatoria correlacionada, $F_i(t)$ ($i = x, y$), obedece la siguiente ecuación diferencial

$$\frac{dF_i(t)}{dt} = -\frac{F_i(t)}{\tau_e} + \zeta_i(t), \quad (4.6)$$

donde τ_e es el tiempo de correlación de $F_i(t)$ y $\zeta_i(t)$ es un ruido blanco gaussiano que satisface las siguientes relaciones

$$\langle \zeta_i(t) \rangle = 0, \quad (4.7)$$

$$\langle \zeta_i(t) \zeta_j(t') \rangle = \frac{f_o^2}{\tau_e^2} \delta(t - t') \cdot \delta_{ij}. \quad (4.8)$$

De modo que $F_i(t)$ también tiene promedio cero, $\langle F_i(t) \rangle = 0$, y obedece una función de correlación exponencial

$$\langle F_i(t) F_j(t') \rangle = \frac{f_o^2}{2\tau_e} e^{-\frac{(t-t')}{\tau_e}} \cdot \delta_{ij}. \quad (4.9)$$

La magnitud de la fuerza externa está dada por $F_o = \frac{f_o}{\sqrt{2\tau_e}}$.

Como se observa, las relaciones de $f_i(t)$ y de $F_i(t)$ son las mismas para x como para y , debido a lo cual estas fuerzas actúan de igual forma y con los mismos parámetros en ambas direcciones. Para el análisis, se considera que estas cuatro fuerzas ($f_x(t)$, $f_y(t)$, $F_x(t)$ y $F_y(t)$) actúan de manera independiente, ya que cada una de ellas proviene de un ruido gaussiano independiente y, por lo tanto, se encuentran descorrelacionadas entre sí.

4 Solución numérica

En esta sección se presenta el método numérico empleado para resolver las ecuaciones planteadas previamente, así como su discretización y adimensionalización. También se hace una breve discusión acerca de los parámetros adimensionales.

El sistema en dos dimensiones presenta aspectos más complejos que el caso en una dimensión debido a que la partícula browniana puede ligarse y desligarse del filamento y su comportamiento cuando está ligada y cuando está desligada es esencialmente distinto. Por lo tanto, además de estudiar la corriente de la partícula de manera global, se considera su comportamiento en los estados ligado y desligado de manera independiente. Se analizan también los *tiempos de residencia* en ambos estados y la *probabilidad de permanencia* de la partícula en el filamento, es decir, ligada. Por otra parte, se estudió la *distribución de probabilidad* de la partícula browniana, su evolución temporal y la difusión. Más adelante se describe con detalle cada uno de estos análisis.

4.1 Método numérico

Para el cálculo de soluciones numéricas se ha empleado el mismo método numérico que en el caso de una dimensión (ver la sección 8 del Capítulo 3), con las diferencias requeridas para su adaptación a dos dimensiones. Se agregaron los algoritmos necesarios para el cálculo de los tiempos de residencia y la distribución de probabilidad. En el Apéndice C se muestra el código del programa desarrollado en lenguaje FORTRAN desarrollado.

El paso de tiempo del programa es el mismo que el utilizado en el programa para una dimensión, es decir, $\Delta t = 10^{-4}$. Éste cumple todas las condiciones requeridas, ya que el resto de los parámetros temporales se encuentran dentro de los mismos límites en ambos casos.

Fue necesario extender el número de pasos de tiempo a 10^8 para unos casos y a 5×10^8 en otros para poder determinar con mayor precisión la tendencia de ciertos fenómenos que surgen en el problema en dos dimensiones. Esto implica que $t \in [0, 10^4]$ y $t \in [0, 50 \times 10^4]$, respectivamente. Para que la estadística fuera suficientemente buena, se consideró un número de realizaciones de entre 2×10^3 y 10^4 , sobre las cuales se llevaron a cabo los promedios.

El número de pasos de tiempo y de realizaciones mencionados, implican tiempos de computo del programa en cuestión de entre 5 días y 3 semanas en un procesador Alpha de 700 MHz.

En todos los casos que se analizan en este capítulo, la posición inicial de la partícula es $x(0) = 0$ y $y(0) = 0$, es decir, la partícula se encuentra inicialmente ligada al filamento, en el fondo del pozo ubicado en el origen.

Los generadores de números aleatorios utilizados fueron los mismos que los correspondientes al programa en una dimensión (ver Apéndice D). Sin embargo, en este caso se requirieron cuatro generadores independientes, cada uno con su propia subrutina, ya que ahora se tienen cuatro ruidos independientes.

4.2 Discretización y adimensionalización

La discretización se lleva a cabo de la misma manera que en el Capítulo 3 (ver ecs.(3.90) y (3.94)), tomando como definición del tiempo discretizado $t = n\Delta t$. Mediante este pro-

cedimiento se llega a las siguientes relaciones de recurrencia para las ecs.(4.2) y (4.3)

$$\begin{aligned}
x(n\Delta t) &= x((n-1)\Delta t) - \frac{\Delta t}{\gamma} \frac{\partial V(x,y)}{\partial x} + \sqrt{\frac{2kT\Delta t}{\gamma}} \xi_x^n \\
&+ \frac{f_o\Delta t^{\frac{3}{2}}}{\gamma\tau_e} \sum_{m=0}^{n-1} \zeta_x^m e^{-\frac{(n-m)\Delta t}{\tau_e}}, \quad (4.10)
\end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}
y(n\Delta t) &= y((n-1)\Delta t) - \frac{\Delta t}{\gamma} \frac{\partial V(x,y)}{\partial y} + \sqrt{\frac{2kT\Delta t}{\gamma}} \xi_y^n \\
&+ \frac{f_o\Delta t^{\frac{3}{2}}}{\gamma\tau_e} \sum_{m=0}^{n-1} \zeta_y^m e^{-\frac{(n-m)\Delta t}{\tau_e}}. \quad (4.11)
\end{aligned}$$

En estas ecuaciones aparecen 4 parámetros independientes, estos son: γ y kT , propiedades del fluido; y f_o y τ_e , parámetros correspondientes a la fuerza externa. Sin embargo, adicionalmente existen los 4 parámetros correspondientes al potencial filamento, es decir: la profundidad V_1 del filamento, su ancho s , la amplitud V_o de la estructura periódica asimétrica y su periodo λ . De modo que en total se tienen 8 parámetros independientes. Se define $m = 1$, por lo que γ es el coeficiente de fricción por unidad de masa. Para la adimensionalización se eligen $\tau = \frac{1}{\gamma}$ y λ como unidades de tiempo y longitud, respectivamente. Dada esta elección, se expresan los otros cuatro parámetros así como el resto de las cantidades en la ecuación en unidades adimensionales. Esto es: $\tilde{x} = \frac{x}{\lambda}$, $\tilde{s} = \frac{s}{\lambda}$, $\tilde{\Delta t} = \frac{\Delta t}{\tau}$, $\tilde{\tau}_e = \frac{\tau_e}{\tau}$, $\tilde{kT} = \frac{kT\tau^2}{\lambda^2}$, $\tilde{V}_o = \frac{V_o\tau^2}{\lambda^2}$, $\tilde{V}_1 = \frac{V_1\tau^2}{\lambda^2}$, y $\tilde{f}_o = \frac{f_o\tau^{3/2}}{\lambda}$. Dividiendo las ecs.(4.10) y (4.11) entre λ , escribiéndolas en función de las cantidades adimensionales y substituyendo la relación de recurrencia ec.(3.100) para la fuerza externa se llega a que

$$\begin{aligned}
x(n\Delta t) &= x((n-1)\Delta t) - \Delta t K_x(x,y) + \sqrt{2kT\Delta t} \xi_x^n \\
&+ F_x((n-1)\Delta t) e^{-\frac{\Delta t}{\tau_e}} + f_o\sqrt{\Delta t} \zeta_x^n \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_e}}\right), \quad (4.12)
\end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}
y(n\Delta t) &= y((n-1)\Delta t) - \Delta t K_y(x,y) + \sqrt{2kT\Delta t} \xi_y^n \\
&+ F_y((n-1)\Delta t) e^{-\frac{\Delta t}{\tau_e}} + f_o\sqrt{\Delta t} \zeta_y^n \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_e}}\right), \quad (4.13)
\end{aligned}$$

donde las fuerzas debidas al potencial en ambas direcciones, $\frac{\partial V(x,y)}{\partial x} = K_x(x,y)$ y $\frac{\partial V(x,y)}{\partial y} = K_y(x,y)$, están dadas por

$$K_x(x,y) = -2\pi V_o \left[\cos(2\pi x) + \frac{8}{10} \cos(4\pi x) + \frac{6}{10} \cos(6\pi x) \right], \quad (4.14)$$

y

$$K_y(x, y) = \frac{2y}{s} e^{-\frac{y^2}{s}} \left[V_1 + V_o \left(\sin(2\pi x) + \frac{4}{10} \sin(4\pi x) + \frac{2}{10} \sin(6\pi x) \right) \right]. \quad (4.15)$$

Se han omitido los símbolos “tilde” en el entendido de que todas las cantidades están escritas en unidades adimensionales.

4.3 Parámetros

Una vez adimensionalizadas las ecuaciones, el número de parámetros independientes se ha reducido de 8 a 6. Los parámetros correspondientes al potencial se han fijado con valores tales que los efectos del potencial sobre la partícula browniana coincidan de manera cualitativa con lo observado en los experimentos [1, 21–24].

Se fijó $V_o = 2$, mismo valor que en el caso de una dimensión. A partir de éste, se ensayó variando los parámetros V_1 y s , así como el resto de los parámetros (kT , f_o y τ_e). Se encontró que para los intervalos de valores de kT , f_o y τ_e en los que se presenta corriente, con $V_1 = 15$ y $s = 2$ el comportamiento es similar al observado en los experimentos. La profundidad del filamento, V_1 , y su ancho, s , son tales que la partícula browniana es “atrapada” en cuanto se acerca lo suficiente al filamento (y no lo atraviesa, como sucede con filamentos más angostos), pero a la partícula le es posible desligarse con cierta probabilidad una vez que se encuentra dentro. Dadas las características del potencial filamento, se define como una partícula ligada al filamento al tiempo t si $|y(t)| \leq 2.5$. Si esta condición no se cumple, se considera que la partícula se encuentra desligada del filamento.

Se encontró una corriente significativa para los siguientes valores de los otros tres parámetros: $kT = 1$, $f_o = 2.5$ (equivalente a $F_o = 3.1 \times 10^2$) y $\tau_e = 0.1$. Estos valores se asemejan a los correspondientes del caso en una dimensión, para los cuales se encontró una corriente máxima. No se ha hecho énfasis en encontrar valores de los parámetros para los cuales se de una corriente máxima. Simplemente se buscaron aquellos valores para los cuales el comportamiento global del sistema fuera cualitativamente similar al de los experimentos. Por lo tanto, no se presentan resultados de variación de corriente en función de los parámetros. Con los valores de los parámetros definidos aquí se realizó el análisis de este sistema bidimensional. Sin embargo, es importante mencionar que el comportamiento de este sistema es altamente sensible a variaciones en la profundidad y ancho del filamento.

5 Resultados de la solución numérica y su análisis

A continuación se presentan y discuten los resultados obtenidos a partir de las soluciones numéricas para los valores de los parámetros arriba mencionados.

5.1 Partícula libre

En primera instancia, se revisan los resultados del problema en ausencia de potencial y de fuerza externa con el propósito de verificar que el sistema de una partícula libre se comporta adecuadamente. En la gráfica (A) de la Figura 4.3 se muestra la posición promedio, $\langle x \rangle$ vs $\langle y \rangle$, de 10^4 realizaciones y con $kT = 1$. Se observa que el movimiento promedio de la

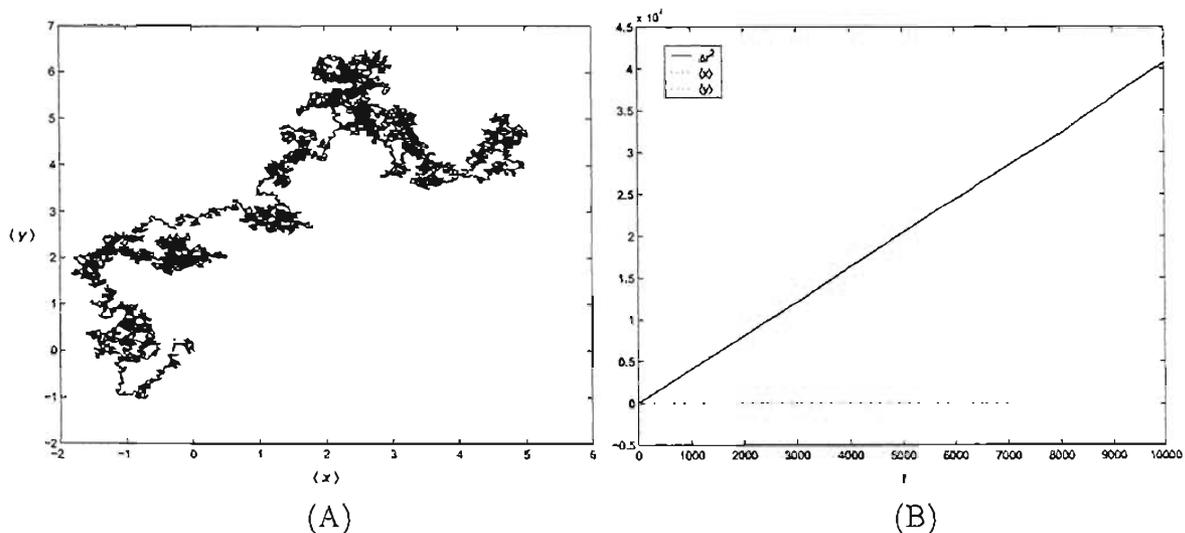


Figura 4.3: Gráficas correspondientes a 10^4 realizaciones de una partícula libre, sin potencial ($V_o = 0$), sin fuerza externa ($f_o = 0$) y con $kT = 1$. (A) Posición promedio, $\langle x \rangle$ vs $\langle y \rangle$. (B) Desviación cuadrática media, $\Delta r^2 = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle - \langle x \rangle^2 - \langle y \rangle^2$, y posición promedio en ambos ejes, $\langle x \rangle$ y $\langle y \rangle$, respecto del tiempo.

partícula no tiene una dirección preferencial y se aleja del origen unas cuantas unidades, es decir, unos cuantos pozos. Para que el desplazamiento promedio sea más pequeño se requiere que el número de realizaciones sea muy grande, pero 10^4 realizaciones son suficientes para ilustrar el hecho de que no existe corriente. En la gráfica (B) de la Figura 4.3 se muestran la posición promedio en los ejes x y y , además de la desviación cuadrática media para el mismo caso. Es claro que el desplazamiento promedio es prácticamente nulo. En lo que se refiere a la desviación cuadrática media $\Delta r^2 = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle - \langle x \rangle^2 - \langle y \rangle^2$, el

resultado numérico obtenido es $\Delta r^2 \approx 4 \times 10^4$, en $t = 10^4$. Este resultado corresponde de manera aproximada al predicho por la teoría para $N = 2$ (ver ec.(3.6)), ya que $kT = 1$, entonces $D = 1$ y por lo tanto $\Delta r^2 = 2NDt = 4 \times 10^4$.

5.2 Partícula libre con fuerza externa dependiente del tiempo

El siguiente caso a analizar es el que corresponde a la partícula libre (sin potencial) pero ahora en presencia de la fuerza externa dependiente del tiempo. Se observa en la gráfica (A) de la Figura 4.4 que de nuevo el desplazamiento promedio no tiene una dirección preferencial. No obstante, que en este caso la partícula se aleja un poco más del origen que en el caso anterior, se puede asegurar que no hay corriente. La ausencia de un mecanismo que rompa la simetría del sistema impide que exista transporte dirigido.

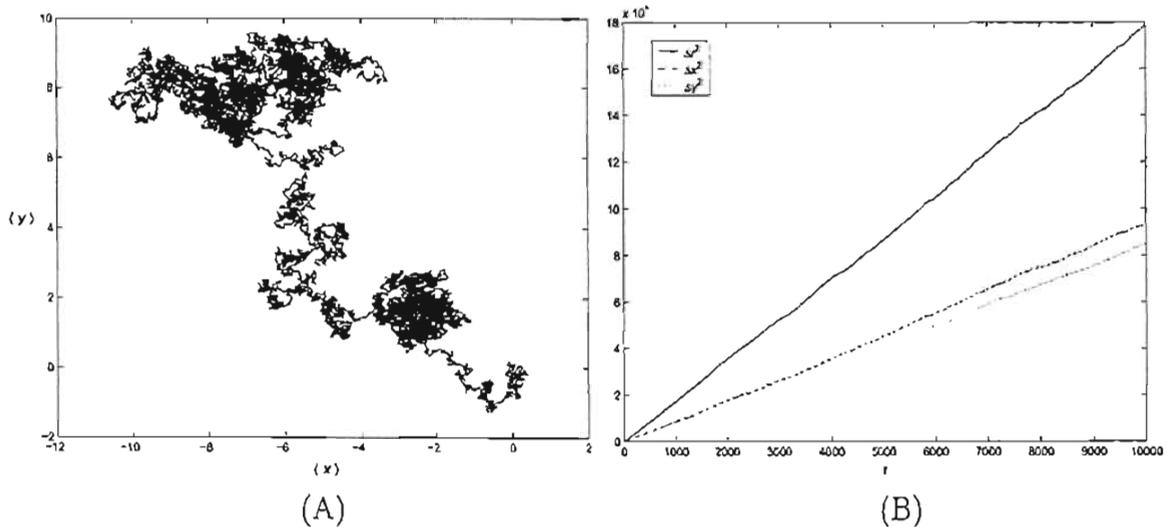


Figura 4.4: Gráficas correspondientes a 10^4 realizaciones de la partícula en presencia de la fuerza externa ($f_o = 2.5$ y $\tau_e = 0.1$), sin potencial ($V_o = 0$) y con $kT = 1$. (A) Posición promedio, $\langle x \rangle$ vs $\langle y \rangle$. (B) Desviación cuadrática media, $\Delta r^2 = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle - \langle x \rangle^2 - \langle y \rangle^2$, respecto del tiempo.

En la gráfica (B) de la Figura 4.4 se muestra tanto la desviación cuadrática media, $\Delta r^2 = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle - \langle x \rangle^2 - \langle y \rangle^2$, como las independientes en cada eje. En este caso, la difusión efectiva es mayor que la correspondiente al caso anterior, debido a la presencia de la fuerza externa, que contribuye a que la partícula se disperse.

5.3 Partícula con fuerza externa dependiente del tiempo y potencial filamento

A continuación se añade el potencial filamento discutido anteriormente, con los parámetros ya mencionados. Entonces, se tienen ya todos los ingredientes necesarios para que se presente el fenómeno de la corriente.

Inicialmente, se presentan en la Figura 4.5 las gráficas correspondientes a la trayectoria en el plano xy de cuatro realizaciones de una partícula. En estas gráficas se observa como

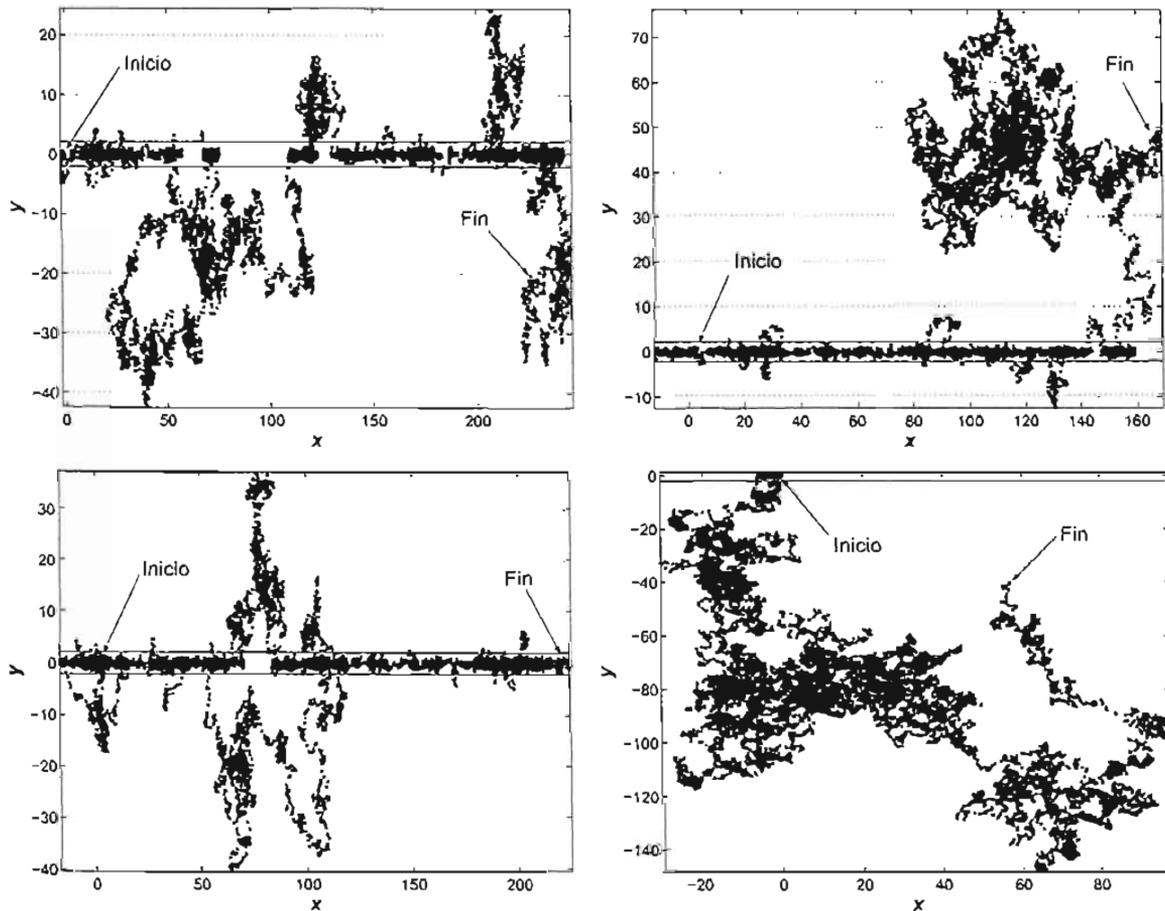


Figura 4.5: Trayectorias el plano xy de cuatro realizaciones de una partícula con fuerza externa dependiente del tiempo y potencial filamento. Cada realización es de 10^7 pasos de tiempo, es decir, comprende el intervalo de tiempo de $t \in [0, 10^3]$.

las partículas cruzan la la frontera $y = \pm 2.5$, es decir se ligan y desligan del filamento, constantemente. Se observa también que una vez que se encuentran ligadas al filamento

tienden a moverse preferentemente en la dirección positiva del eje x , mientras que cuando se están desligadas se comportan como caminantes al azar, es decir, de la misma manera que lo analizado en la caso anterior.

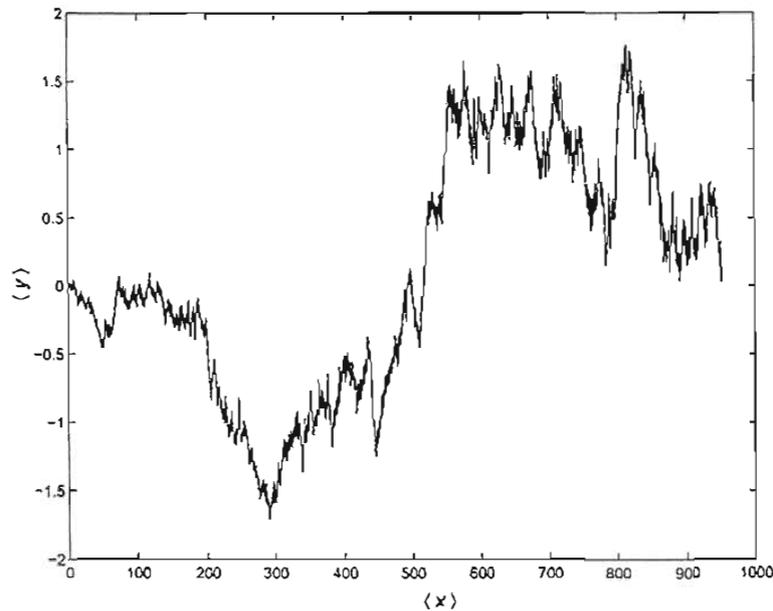


Figura 4.6: Posición promedio de 10^4 realizaciones con 10^8 pasos de tiempo, para una partícula con potencial ($V_0 = 2$, $V_1 = 15$ y $s = 2$), con fuerza externa ($f_0 = 2.5$ y $\tau_e = 0.1$) y con $kT = 1$.

Se procede ahora a analizar las cantidades promedio. En la Figura 4.6 se muestra la gráfica de $\langle x \rangle$ vs $\langle y \rangle$. En dicha gráfica, se observa que en la dirección del eje y , la partícula en promedio no se desplaza mas allá de $y = \pm 2$. Se puede decir que en promedio no se desliga del filamento. En contraste, se observa una desplazamiento promedio considerable en el sentido positivo del eje x . En promedio, la partícula se ha desplazado aproximadamente 970 pozos de potencial a lo largo del filamento, después de 10^8 pasos de tiempo, haciendo evidente la presencia de corriente.

5.4 Difusión

Previo al análisis de la corriente, se estudian las propiedades difusivas del sistema. En la Figura 4.7 se muestra la gráfica de la desviación cuadrática media total, $\Delta r^2 = \langle x^2 + y^2 \rangle - (\langle x \rangle^2 + \langle y \rangle^2)$, y las gráficas de la desviación cuadrática media independiente en cada eje. En primer lugar, se observa que la difusión efectiva del sistema sigue una ley de potencias

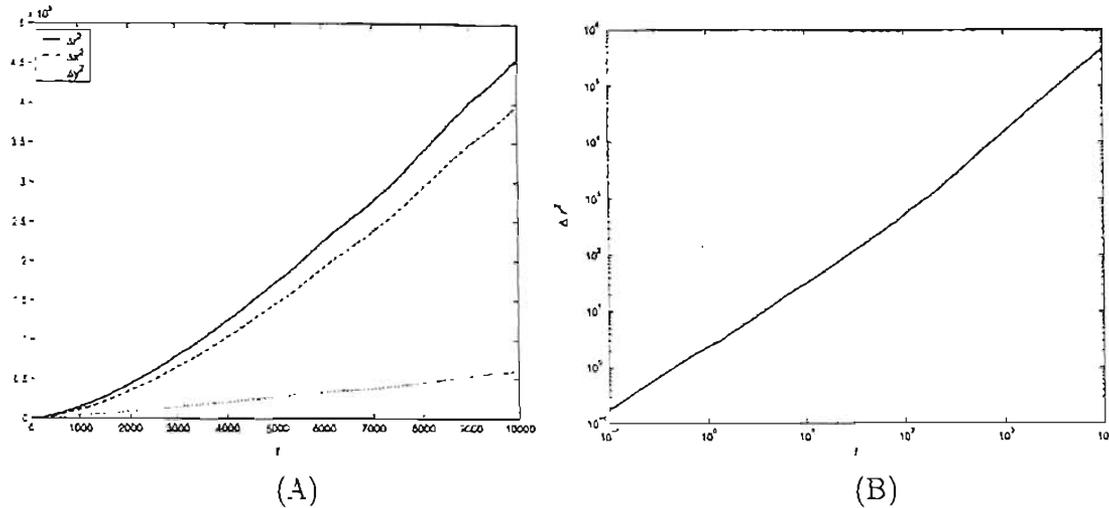


Figura 4.7: (A) Desviación cuadrática media total (global), $\Delta r^2 = \langle x^2 + y^2 \rangle - (\langle x \rangle^2 + \langle y \rangle^2)$, desviación cuadrática media en x , $\Delta x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$, y en y , $\Delta y^2 = \langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2$. Mismas condiciones que en la Figura 4.6. (B) Logaritmo de la desviación cuadrática media total en función del logaritmo del tiempo.

t^α con $\alpha \approx 1.48$ a partir de $t \approx 100$ (ver gráfica (B) de la Figura 4.7). Es decir, se tiene un comportamiento superdifusivo, no crece linealmente conforme transcurre el tiempo, como sucede en el caso unidimensional.

En la dirección x también se encuentra un comportamiento superdifusivo, mientras que en la dirección y la difusión es lineal. La presencia del potencial rompe la homogeneidad del sistema y provoca que el sistema responda de diferente manera en cada dirección. Es importante hacer notar que la difusión en presencia del potencial es más de un orden de magnitud mayor respecto al caso sin potencial debido a la existencia de la corriente.

La presencia de superdifusión en este sistema se explica por el siguiente argumento. Cuando la partícula permanece ligada al filamento, está en todo momento bajo la influencia del potencial asimétrico y tiende a desplazarse preferentemente en la dirección positiva del eje x . Mientras que, cuando la partícula se desliga al inicio del proceso y no regresa al estado ligado, se comporta como un caminante al azar y se dispersa alrededor del origen. Entonces, la partícula pueda encontrarse en posiciones muy alejadas dependiendo de si ha permanecido ligada o desligada del filamento. La combinación de estos casos extremos tiene como resultado que Δx^2 , y por lo tanto Δr^2 , sea más grande y que crezca a un ritmo mayor que si la partícula permaneciera siempre en uno de los estados. Las diferencias inherentes de comportamiento entre los estados ligado y desligado son el motivo de la

existencia de superdifusión en el sistema. El caso unidimensional es equivalente al caso en el que la partícula permanece siempre ligada al filamento, donde a pesar de haber corriente la difusión efectiva crece linealmente con t .

5.5 Corriente

A continuación se analiza la corriente. Con este propósito, se obtiene la posición promedio global (de todas las realizaciones) para cada tiempo. Sin embargo, también se analiza la corriente considerando por separado la estadística de las realizaciones cuando la partícula se encuentra ligada y desligada del filamento, recordando que se definió como una partícula ligada del filamento al tiempo t si $|y(t)| \leq 2.5$. En la gráfica (A) de la Figura 4.8 se muestra la posición promedio de la componente x para cada uno de los tres casos descritos. En

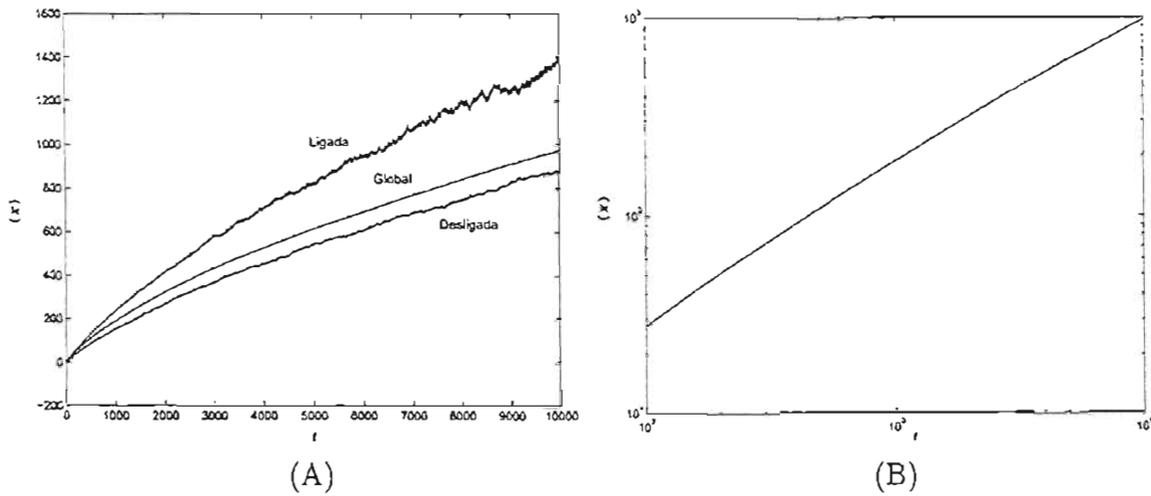


Figura 4.8: (A) Posición promedio respecto del tiempo de la partícula cuando se encuentra ligada, desligada y el caso global (ligada o desligada). (B) Logaritmo de la posición promedio respecto del logaritmo del tiempo para el caso global.

todos los casos se observa corriente en la dirección positiva del eje x . La mayor corriente corresponde al caso cuando la partícula está ligada, le sigue el caso global y la corriente menor es aquella de la partícula cuando está desligada. En todos los casos la velocidad disminuye conforme transcurre el tiempo, no es constante como sucede en una dimensión. En la gráfica (B) de la Figura 4.8 se observa que, para el caso global, la corriente sigue la ley de potencias $j_x = \frac{d\langle x \rangle}{dt} \sim ct^{-\beta}$ con $\beta \approx 0.3$.

Debido a que todas las realizaciones inician con la partícula ligada al filamento, a

tiempos cortos las curvas correspondientes a la partícula ligada y a la global son iguales. Conforme transcurre el tiempo estas curvas se separan y el comportamiento de la curva global tiende a parecerse a la de la desligada. Como se verá más adelante, esto ocurre debido a que la *probabilidad de permanencia* en el estado ligado disminuye conforme transcurre el tiempo. El decaimiento de la velocidad respecto al tiempo es también una consecuencia de que dicha *probabilidad de permanencia* decrezca. Aún así, se observa que incluso cuando la partícula está desligada presenta corriente. Esto se explica por que constantemente pasa del estado ligado al desligado, debido a lo cual, a pesar de encontrarse desligada del filamento, en algún momento estuvo ligada y bajo la influencia del potencial asimétrico, en consecuencia en promedio fue transportada.

5.6 Probabilidad de permanencia

La probabilidad de permanencia se define como la probabilidad de encontrar a la partícula en el estado ligado (con $|y(t)| \leq 2.5$) al tiempo t , considerando que inicialmente se encontraba en el origen ($y(0) = 0$). Esta probabilidad se ha normalizado con el total de las realizaciones.

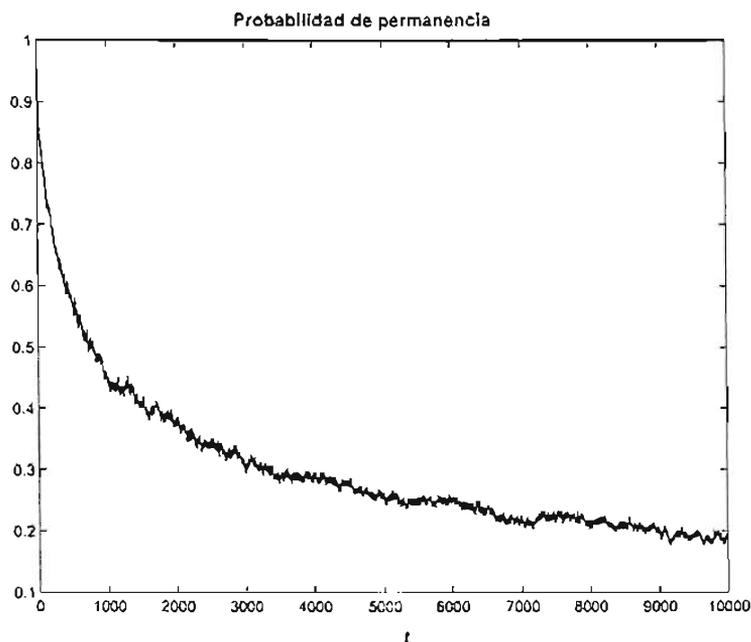


Figura 4.9: Probabilidad de permanencia como función del tiempo, para el intervalo de tiempo $t \in [0, 10^4]$ y para 2000 realizaciones.

Se observa, en la gráfica de la Figura 4.9, como la probabilidad de permanencia disminuye de modo tal que en $t = 10^3$ se reduce a la mitad. Conforme transcurre el tiempo, dicha probabilidad continua disminuyendo, aunque cada vez más lentamente, hasta llegar a aproximadamente 0.2 en $t = 10^4$. Hasta este punto la probabilidad de permanencia parece estabilizarse en un valor constante. Sin embargo, para el número de pasos utilizado de tiempo no es posible dar una conclusión definitiva. Para verificar si efectivamente se

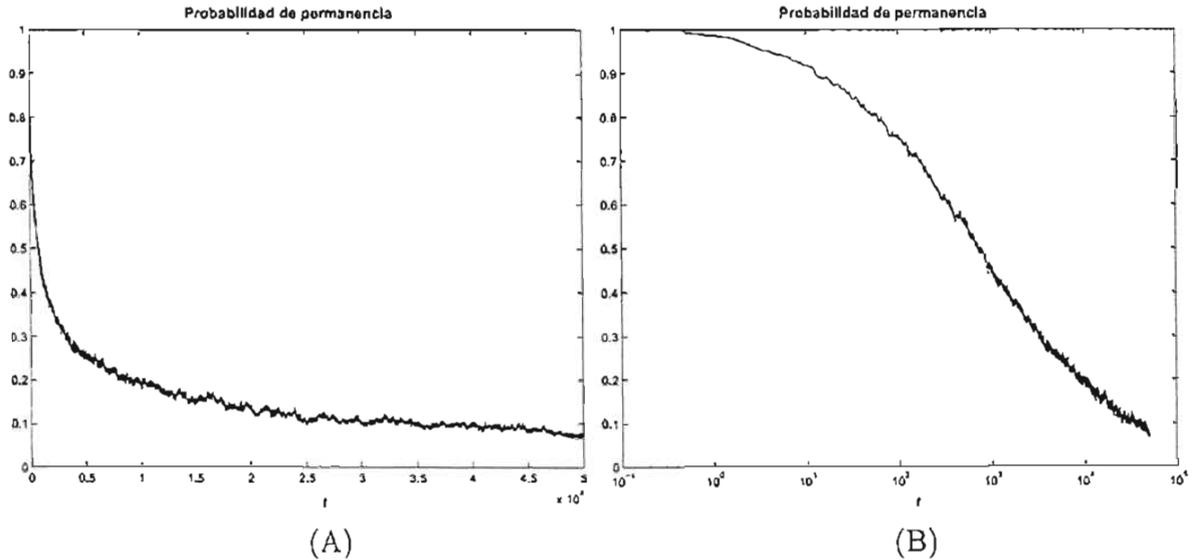


Figura 4.10: (A) Probabilidad de permanencia en función del tiempo para el intervalo $t \in [0, 5 \times 10^4]$ y para 2000 realizaciones. (B) Probabilidad de permanencia en función del logaritmo del tiempo para el mismo intervalo y el mismo número de realizaciones.

estabiliza, si continua disminuyendo indefinidamente o si presenta un comportamiento más complicado, se llevó a cabo un corrida para un intervalo de tiempo de $t \in [0, 5 \times 10^4]$. Una corrida para este intervalo de tiempo implica 5×10^8 pasos de tiempo para cada una de las 2000 realizaciones, es decir, 10^{12} ciclos¹. En la gráfica (A) de la Figura 4.10 se muestra la probabilidad de permanencia para este intervalo de tiempo extendido, donde se observa que simplemente se mantiene disminuyendo, y en $t = 5 \times 10^4$ ya es menor a 0.1. Con la intención de examinar el comportamiento de esta curva, se graficó en escala semilogarítmica (ver gráfica (B) de la Figura 4.10). Se advierte que para t entre 10^2 y 10^3 la curva podría ser aproximada por un decaimiento logarítmico, sin embargo, para tiempos más grandes el

¹Una corrida de 10^{12} ciclos del programa en cuestión implica 3 semanas de tiempo de proceso para un procesador Alfa de 700MHz.

decaimiento parece ser aún más lento. A partir de estos resultados, se puede concluir que la probabilidad de permanencia seguirá disminuyendo indefinidamente, pero a un ritmo cada vez más lento, con un decaimiento al menos logarítmico, y será cero sólo en el límite cuando $t \rightarrow \infty$.

5.7 Tiempos de residencia

Se procede ahora a estudiar los *tiempos de residencia*. Existe un tiempo de residencia ligado y un tiempo de residencia desligado. El tiempo de residencia ligado se define como el tiempo que transcurre desde que una partícula se liga al filamento hasta que se desliga por primera vez, lo cual en general sucede varias veces a lo largo de una realización. El tiempo de residencia desligado se define de manera equivalente. Por otra parte, se introduce el concepto de *probabilidad de tiempo de residencia*, que se define como la probabilidad de que cada tiempo de residencia, tanto ligado como desligado, ocurra. En la gráfica (A) de la Figura 4.11, se muestran las gráficas de las probabilidades de residencia ligado, P_l , y desligado, P_d , en función del tiempo de residencia, t_r . Dichas probabilidades están normalizadas con el total de los eventos. Se observa que ambas probabilidades tienen su máximo en el tiempo de residencia más pequeño y decrecen conforme éste se incrementa, aproximándose asintóticamente a cero para valores grandes del tiempo de residencia. Se aprecia también que la probabilidad de tiempo de residencia desligado, P_d , decrece más lentamente que la correspondiente al tiempo de residencia desligado, P_d .

En la gráfica (B) de la Figura 4.11, se muestra la probabilidad de tiempo de residencia ligado en escala semilogarítmica. Se aprecia que ésta describe una recta, indicando que dicha probabilidad tiene un decaimiento exponencial. Se halló por mínimos cuadrados que $P_d \sim e^{-\epsilon_d \cdot t_r}$ con $\epsilon_d \approx 0.04$. La probabilidad de tiempo de residencia ligado es en realidad una probabilidad de escape (P_e) del pozo de potencial que representa el filamento. Existen a la fecha una enorme cantidad de trabajos al respecto del problema de la probabilidad de escape activado por ruido térmico [40, 41]. En términos generales, se ha encontrado en dichos trabajos que $P_e(t) \sim e^{-U \cdot t}$, donde U es proporcional a la profundidad del pozo de potencial e inversamente proporcional a la intensidad del ruido. Por lo tanto, los resultados encontrados en el presente análisis concuerdan con la teoría y muestran que $\epsilon_d \sim V_1$.

Por otra parte, de la gráfica de la probabilidad de tiempo de residencia desligado en escala logarítmica ((C) de la Figura 4.11), se observa que ésta se aproxima asintóticamente

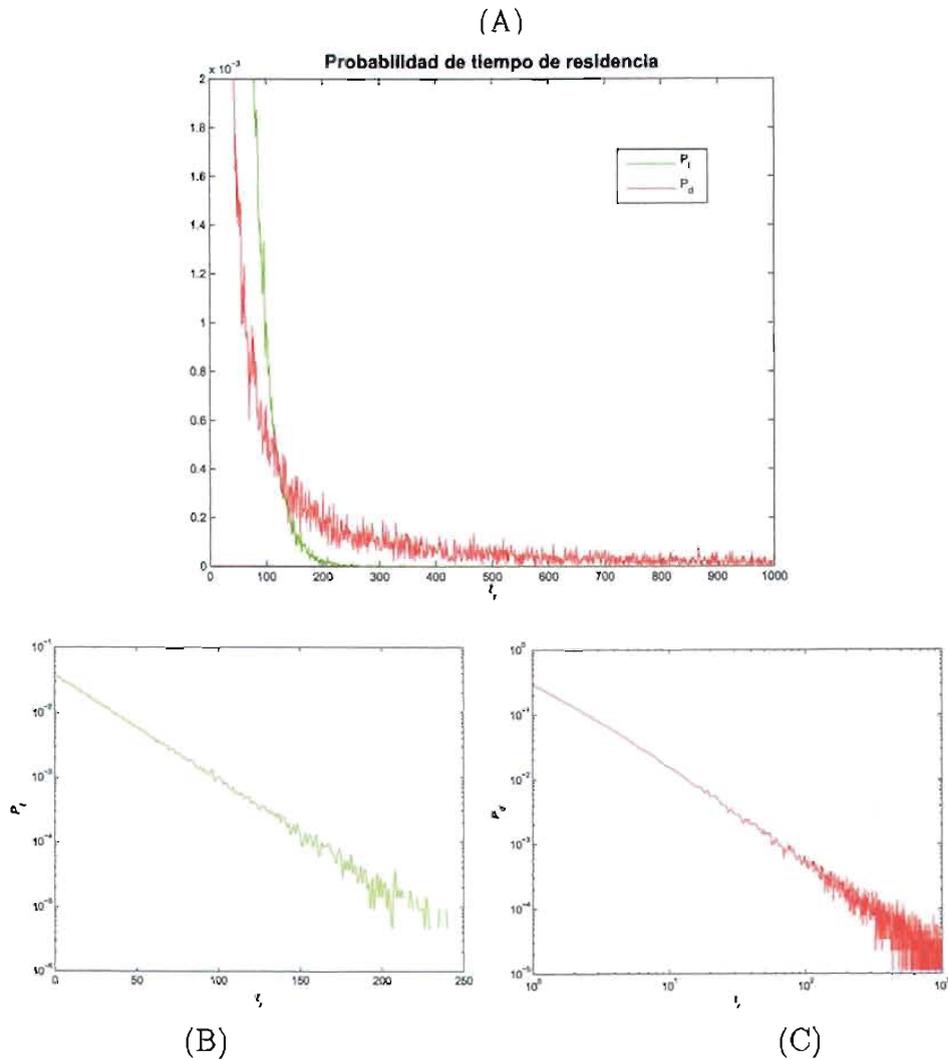


Figura 4.11: Probabilidad de tiempo de residencia ligado (P_l) y desligado (P_d) en función del tiempo de residencia.

a una recta, lo que significa que sigue un ley de potencias. Por mínimos cuadrados se encontró que $P_f \sim tr^{-\epsilon_f}$ con $\epsilon_f \approx 1.5$. Respecto a este resultado, existe el teorema de Sparre Andersen, el cual establece que la probabilidad de que un caminante al azar en una dimensión cruce el origen, dado que inició en $x_o \geq 0$ sigue el comportamiento universal $f(t) \sim t^{-3/2}$ para cualquier distribución simétrica de longitudes de pasos discretos [42, 43]. La probabilidad de tiempo de residencia desligado cumple con dichas condiciones y su comportamiento concuerda con lo establecido por el teorema de Sparre Andersen.

Con base en estos resultados, se llega a la conclusión que la partícula tiende a permanecer tiempos cortos en ambos estados, sin embargo, sus tiempos de residencia en el

estado desligado son mayores que en el estado ligado. Esto está en concordancia con el hecho, observado en la subsección anterior, de que la probabilidad de encontrar a la partícula en el estado ligado disminuye conforme transcurre el tiempo.

5.8 Distribución de probabilidad

El siguiente punto a estudiar es la *distribución de probabilidad*, es decir, la distribución espacial de la partícula browniana en el plano xy y su evolución temporal. Con este propósito se añadió en el programa un algoritmo que guarda la posición de cada una de las realizaciones a ciertos tiempos predeterminados, obteniéndose en el proceso una “fotografía” de todas las realizaciones simultáneamente en cada uno de los tiempos elegidos. Estas fotografías muestran de manera gráfica la distribución de probabilidad en forma de “nubes de partículas”. Aunque así se manejará, en realidad no son muchas partículas, sino la representación de muchas realizaciones de la misma partícula. Esta distribución de probabilidad o nube de partículas coincide con la cantidad

$$\rho(x, y, t) = \int dF_x \int dF_y \mathcal{W}(x, y, F_x, F_y, t) \quad (4.16)$$

discutida en el Capítulo 3.

En la Figura 4.12 se muestran nueve nubes de partículas graficadas en el plano xy , para nueve distintos tiempos a la largo del intervalo $t \in [0, 10^4]$. Todas las gráficas están en la misma escala. Al comienzo del proceso difusivo (primeras tres nubes) se percibe una estructura circular y no es evidente la presencia de corriente. A la escala de las gráficas, se aprecia que el centro de la nube se encuentra cerca del origen. Sin embargo, conforme transcurre el tiempo esta estructura circular comienza a deformarse y las nubes van adquiriendo una forma que se asemeja a una “punta de flecha”, cuyo centro se encuentra claramente desplazado en la dirección positiva del eje x , pero aparentemente sobre el mismo eje x . Es decir, se aprecia una simetría respecto al eje x y una asimetría respecto el eje y , debida esta última a la inhomogeneidad producida por el potencial y a la corriente sobre el filamento.

Es claro, una vez más, que las partículas ligadas al filamento son las que presentan una mayor corriente. Por otra parte, mientras más cerca se encuentren del filamento mayor será la probabilidad de que se ligen y, en consecuencia, que presenten un movimiento preferencial en la dirección positiva del eje x . Este es el motivo por el cual las partículas

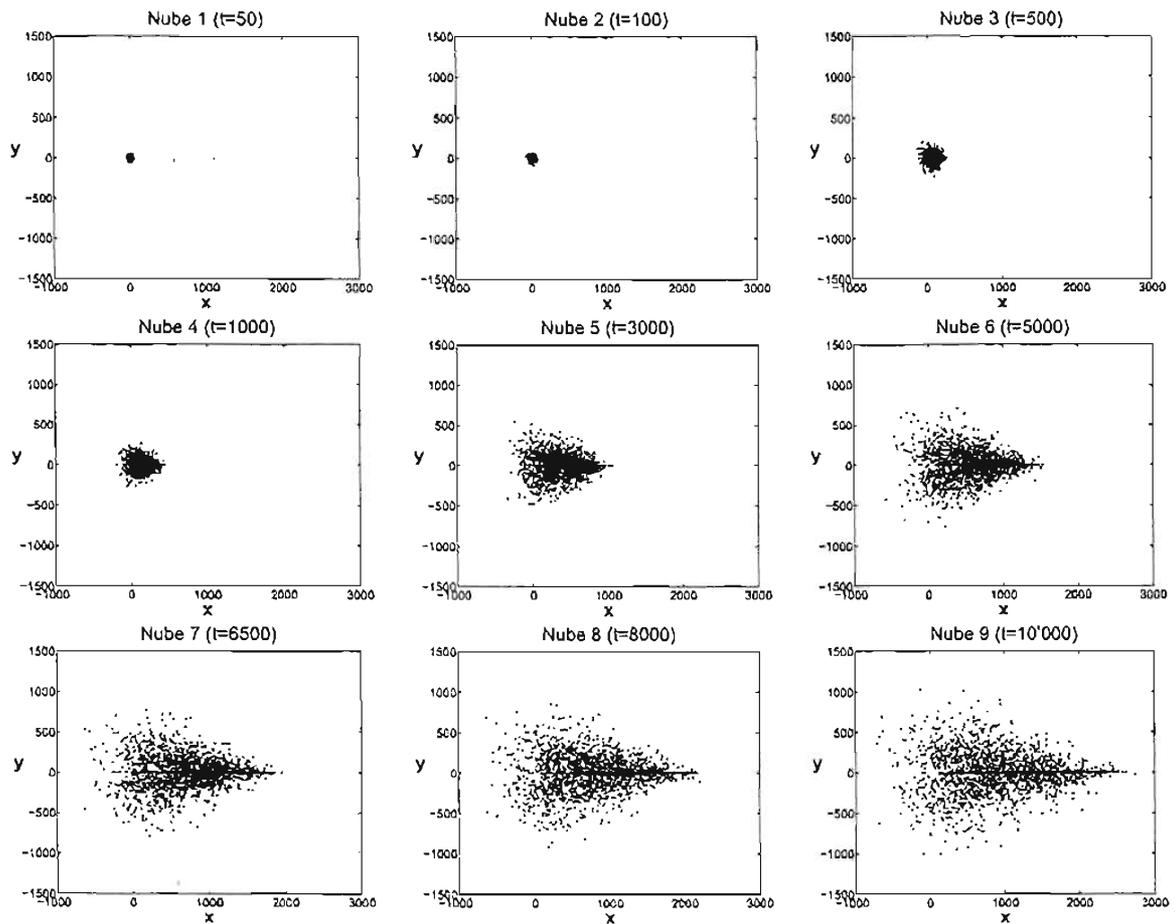


Figura 4.12: Distribuciones de probabilidad o nubes de partículas para nueve distintos tiempos a la largo del intervalo $t \in [50, 10^4]$ para 2000 realizaciones.

más alejadas del filamento se encuentran más cerca del eje $x = 0$ y las más cercanas al filamento se encuentran más lejos del eje $x = 0$. Esto tiene como resultado la estructura de “punta de flecha”.

Es importante señalar que, a pesar de que sólo una parte de las partículas están ligadas al filamento, todas en conjunto se desplazan hacia la derecha produciéndose un efecto de arrastre global ó transporte colectivo. Esta apreciación está en concordancia con lo mencionado respecto a la Figura 4.8, donde se observa que no sólo el promedio global de la partícula presenta una corriente sino también el promedio de la partícula cuando está desligada.

Finalmente, con el objeto de analizar la distribución de probabilidad respecto a ambos

ejes, se presentan las gráficas correspondientes a los histogramas de densidad de partículas. Se emplearon intervalos de 10 unidades para los histogramas, es decir, que cada barra de las gráficas corresponde al número de partículas en un intervalo de 10 unidades.

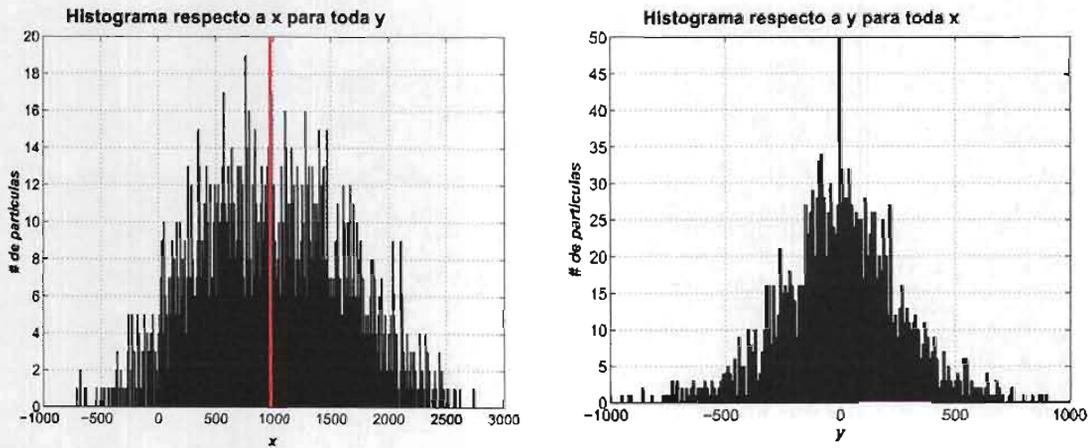


Figura 4.13: Histogramas de la distribución de probabilidad a lo largo de los ejes x y y para $t = 10^4$ (nube 9 de la Figura 4.12).

En la Figura 4.13 se muestran dichos histogramas para $t = 10^4$ (nube 9 de la Figura 4.12). Se verifica que la distribución a lo largo del eje y para toda x es simétrica respecto a $y = 0$. Resalta la presencia de un pico en el centro de la distribución, que llega hasta ≈ 350 , pero que no se aprecia por la escala de la gráfica. Dicho pico representa el número de partículas entre $y = -5$ y $y = 5$ e indica que existe una gran densidad de partículas en el filamento y su vecindad.

En lo que se refiere al histograma a lo largo del eje x para toda y , la media de la distribución de partículas, representada por la línea roja, se encuentra desplazada en la dirección positiva del eje x ($x_m \approx 970$). Se aprecia también una leve asimetría en la forma de la distribución mencionada arriba. Su ancho es mayor del lado derecho de la media.

6 Conclusiones

Se llevó a cabo un análisis numérico de las ecuaciones de Langevin en dos dimensiones, ecs.(4.2) y (4.3), para una partícula browniana sobreamortiguada, en un baño térmico, sujeta a la fuerza debida al potencial filamento ec.(4.1) y a una fuerza externa aleatoria correlacionada.

Los resultados del análisis numérico mostraron que, cuando la partícula browniana se encuentra ligada al filamento ($|y(t)| \leq 2.5$), donde se encuentra bajo la influencia de la estructura asimétrica del potencial, se produce una corriente en la dirección positiva del eje x , y no así en la dirección y . Como era de esperarse, cuando la partícula se encuentra desligada del filamento se comporta como un caminante al azar.

Se observó que la partícula se liga y desliga del filamento constantemente a lo largo de su trayectoria. La corriente promedio sobre el total de las realizaciones en la dirección x disminuye conforme transcurre el tiempo, siguiendo de manera aproximada la ley de potencias $j_x = \frac{d\langle x \rangle}{dt} \sim ct^{-\beta}$, con $\beta \approx 0.3$. No es constante como ocurre en el problema en una dimensión.

De manera similar, se halló que la desviación cuadrática media sigue la ley de potencias t^α con $\alpha \approx 1.48$, de modo que el sistema se comporta de manera superdifusiva. Este hecho contrasta con el caso de una dimensión y con el caso de una partícula libre en cualquier dimensión, donde la desviación cuadrática media crece linealmente con t .

Al llevar a cabo un análisis estadístico por separado de la partícula en el estado ligado y en el desligado, se encontró que la corriente en el primero es mayor que la correspondiente al caso global (ligado y desligado). Sin embargo, al analizar a la partícula cuando se encuentra en el estado desligado, se observa que en promedio también presenta corriente, aunque de menor magnitud. Esto obedece a que la partícula se liga y desliga del filamento constantemente, por lo que, en algún momento estuvo ligada y fue transportada.

Con respecto a la probabilidades de tiempo de residencia, se halló que, tanto en el caso ligado como en el desligado, éstas decaen conforme se incrementan los tiempos de residencia. La probabilidad de tiempo de residencia desligado sigue una ley de potencias ($P_f \sim tr^{-\epsilon_f}$ con $\epsilon_f \approx 1.5$), y su comportamiento coincide con lo establecido por el teorema de Sparre Andersen. Por otro lado, la probabilidad de tiempo de residencia ligado decae exponencialmente ($P_d \sim e^{-\epsilon_d t_r}$ con $\epsilon_d \approx 0.04$). Esta última concuerda con la definición de probabilidad de escape de un pozo de potencial, que también tiene un decaimiento exponencial y a través de la cual se encuentra que ϵ_d es proporcional a la profundidad del filamento V_1 . En conclusión, dado que una decae como una ley de potencias y la otra decae exponencialmente, la partícula tiene una mayor probabilidad de permanecer desligada que ligada para tiempos largos.

La consecuencia de lo anterior es que la probabilidad de permanencia disminuye con-

forme transcurre el tiempo. El decaimiento a tiempos grandes es, al menos, tan lento como un decaimiento logarítmico, de lo que se infiere que sólo en el límite cuando $t \rightarrow \infty$ llegará a ser cero. Este comportamiento explica por qué la corriente también disminuye con el tiempo. Cuando dicha probabilidad sea nula, la corriente habrá desaparecido.

La solución numérica mostró también como la distribución de probabilidad, o “nube de partículas”, se desplaza en la dirección positiva del eje x . Esto sucede a pesar de que sólo una fracción de las partículas se encuentran ligadas al filamento. La presencia del filamento induce corriente sobre el total de las partículas, generándose un fenómeno de arrastre global o transporte colectivo. Esto está en concordancia con el hecho de haber hallado corriente en las partículas desligadas. Después de cierto tiempo las nubes adoptan una estructura que se asemeja a una “punta de flecha”, a diferencia de la forma circular típica de la difusión libre.

La inhomogeneidad introducida a través del potencial filamento genera una distribución de partículas simétrica respecto al eje $y = 0$ y asimétrica respecto al eje $x = x_m$, con una alta densidad de partículas en el filamento y su vecindad.

A partir de lo señalado hasta aquí, se puede afirmar que, sin importar donde se encuentre una partícula, eventualmente se acercará al filamento y su movimiento se verá afectado por la presencia del mismo.

El modelo bidimensional de partícula browniana en el potencial filamento estudiado, reproduce cualitativamente parte del comportamiento observado en experimentos y reportado en las refs.[1, 21–24], como:

- a) La presencia de transporte unidireccional a lo largo de un filamento recto.
- b) La existencia de tiempos de residencia ligados finitos.
- c) El hecho de que a escalas de tiempo grandes respecto al tiempo de residencia, los movimientos de las proteínas consisten en una combinación alternada de secuencias entre el estado ligado y el libre.

Sin embargo, gran parte de la fenomenología descrita requiere ser verificada de manera cuantitativa mediante observaciones experimentales.

Capítulo 5

Conclusiones generales y perspectivas

1 Conclusiones generales

Con el propósito de contribuir a una mejor comprensión de los mecanismos de transporte unidireccional de las proteínas motoras sobre los microtúbulos, en este trabajo se estudió un modelo de motor browniano, el cual está basado en la teoría de Langevin del movimiento browniano. Este modelo consiste en una partícula browniana sobreamortiguada (sin inercia), en un baño térmico descorrelacionado (ruido blanco), sujeta a la fuerza debida a un potencial periódico asimétrico y a una fuerza externa dependiente del tiempo, aleatoria y correlacionada (ruido de color). Se han planteado las ecuaciones de Langevin correspondientes a este modelo para una y dos dimensiones.

Caso unidimensional

Partiendo de la ecuación de Langevin (3.38), se dedujo la ecuación de Fokker-Planck (3.57), equivalente. Mediante estas dos ecuaciones, se llegó a la expresión para la corriente

$$j_x = \frac{d\langle x \rangle}{dt} = -\frac{1}{\gamma} \left\langle \frac{dV(x)}{dx} \right\rangle. \quad (5.1)$$

Haciendo uso de la ecuación de Fokker-Planck (3.57), se ha demostrado que, si el sistema llega a un estado estacionario, $\partial_t \mathcal{W}(x, F_e, t) = 0$, los promedios de las variables del sistema son constantes, en particular $\frac{d\langle x \rangle}{dt} = 0$, por lo tanto no hay corriente.

Se ha demostrado que, cuando la fuerza externa dependiente del tiempo es cero, $F_e = 0$, ó cuando se trata de una fuerza estocástica descorrelacionada (ruido blanco), el sistema se encuentra en equilibrio termodinámico. Por la Segunda Ley de la Termodinámica, en este caso no es posible extraer trabajo del sistema y en consecuencia no puede haber corriente.

También se ha encontrado que, si el potencial $V(x)$ es simétrico y en general no existe un mecanismo que rompa la simetría del sistema, no hay corriente.

Todos estos resultados concuerdan con lo hallado históricamente en una enorme cantidad de trabajos al respecto de este tipo de sistemas, por ejemplo las refs.[4, 5, 12, 33].

Cuando la fuerza externa dependiente del tiempo que se añade está correlacionada (ruido de color) y el potencial es asimétrico, se rompen tanto el equilibrio termodinámico como la simetría del sistema. Por lo tanto, en este caso existe la posibilidad de que se presente corriente.

A continuación, se resolvió numéricamente la ecuación de Langevin variando cada uno de los cuatro parámetros adimensionales del sistema. Con esto se corroboraron los resultados obtenidos analíticamente mediante la ecuación de Fokker-Planck. Se mostró que para el caso en el que se considera un potencial periódico asimétrico y una fuerza externa aleatoria correlacionada, aparece una corriente constante a lo largo del tiempo, cuya magnitud es función de los parámetros adimensionales.

Se halló que la desviación cuadrática media de la posición de la partícula browniana crece linealmente con el tiempo y su coeficiente de difusión efectiva es de casi un orden de magnitud más grande que el correspondiente al caso de la partícula libre.

Se encontró que la corriente no desaparece en el límite hipotético cuando la intensidad del baño térmico es nula, $kT = 0$, y que incluso en algunos casos corresponde al valor máximo de la corriente respecto a valores más grandes de kT . Esto indica que la fuerza térmica del baño es prescindible para que exista corriente. Este último resultado muestra que el fenómeno de la corriente puede presentarse en sistemas macroscópicos, donde las fuerzas térmicas pueden considerarse despreciables. Este mismo resultado se ha reportado en las refs.[14, 36], pero para el caso de sistemas con inercia, deterministas y sujetos a fuerzas externas oscilatorias.

Las soluciones numéricas no muestran evidencia de corriente negativa, es decir, no se encontró inversión de corriente. Esta última se ha reportado en sistemas cerrados con ciertos potenciales especiales, refs.[9, 25], y en sistemas que no desprecian la inercia, refs.[10, 11, 37]. Partiendo de los resultados de este trabajo, se propone la hipótesis de que en sistemas abiertos unidimensionales y sin inercia, como el estudiado en el presente trabajo, *no existe inversión de corriente*. Dicha hipótesis requiere ser verificada analíticamente ó a través de soluciones numéricas, ensayando con diferentes potenciales al utilizado aquí.

Por otra parte, se verificó la equivalencia entre los resultados numéricos de la ecuación de Langevin y los analíticos de la ecuación de Fokker-Planck, a través de las ecuaciones de evolución para los promedios de las cantidades más relevantes del problema. En particular, se verificó la validez de la expresión, ec.(5.1), por lo que se puede afirmar que el promedio de la fuerza producida por el potencial $\langle V'(x) \rangle$, es la cantidad que determina la existencia y magnitud de la corriente en el sistema.

Caso bidimensional

Se introdujo el potencial (4.1), llamado potencial filamento, mediante el cual se modelan las fuerzas atractivas entre el protofilamento y la proteína motora. De este modo, las proteínas motoras tienen la posibilidad de ligarse y desligarse del microtúbulo, a diferencia del caso unidimensional.

Se resolvió numéricamente la ecuación de Langevin correspondiente, considerando el potencial filamento, con la partícula ligada al filamento como condición inicial.

Se mostró que, cuando la partícula browniana se encuentra ligada al filamento, se produce una corriente unidireccional y cuando la partícula se encuentra fuera del filamento, se comporta como un caminante al azar. La corriente neta que se produce disminuye conforme transcurre el tiempo siguiendo, de manera aproximada, una ley de potencias y se anula para tiempos infinitos, a diferencia del caso en una dimensión donde la corriente es siempre constante.

Asimismo, se halló que la desviación cuadrática media de la posición de la partícula sigue una ley de potencias del tiempo, de modo que el sistema presenta superdifusión.

Mediante las probabilidades de tiempo de residencia, se encontró que la partícula tiene una mayor probabilidad de permanecer desligada que ligada para tiempos largos. La probabilidad de tiempo de residencia en estado ligado (partícula en el filamento) decae exponencialmente, mientras la correspondiente para el estado desligado (partícula libre) decae siguiendo una ley de potencias.

La solución numérica mostró también como la distribución de probabilidad, o “nube de partículas”, se desplaza unidireccionalmente, adoptando una estructura que se asemeja a una “punta de flecha”.

Como consecuencia de lo señalado hasta aquí, se puede afirmar que: sin importar donde se encuentre una partícula, eventualmente se acercará al filamento y su movimiento se verá

afectado por la presencia del mismo, presentando un desplazamiento promedio distinto de cero, es decir, corriente.

Finalmente, se puede afirmar que el modelo bidimensional de potencial filamento resulta plausible para describir los procesos intracelulares de transporte de kinesinas sobre protofilamentos de microtúbulos, ya que reproduce cualitativamente parte del comportamiento observado en experimentos y reportado en las refs.[1, 21–24], como:

- a) La presencia de transporte unidireccional a lo largo de un filamento recto.
- b) La existencia de tiempos de residencia ligados finitos.
- c) El hecho de que a escalas de tiempo grandes respecto al tiempo de residencia, los movimientos de las proteínas consisten en una combinación alternada de secuencias entre el estado ligado y el libre.

2 Perspectivas

Se podría profundizar en el análisis de la ecuación de Fokker-Planck hallada, tanto analítica como numéricamente. Esto con el propósito de aproximarse más al entendimiento del fenómeno de la corriente.

Se debe estudiar el problema con diferentes potenciales asimétricos, en particular aquellos potenciales para los cuales se ha reportado inversión de corriente en sistemas cerrados, refs.[9, 25].

La presencia de corriente en el límite cuando la intensidad de la fuerza térmica es nula $kT = 0$, es un resultado que invita a estudiar el problema en sistemas macroscópicos, donde las fluctuaciones térmicas son despreciables.

Para el caso en dos dimensiones ha quedado pendiente realizar un análisis comparativo variando los parámetros adimensionales del sistema. En particular, se debe explorar de esta manera la posible existencia de corriente negativa.

Con el propósito de dar mayor sustento a este trabajo, se requiere realizar un análisis cuantitativo para comparar los resultados aquí encontrados y las mediciones realizadas en los experimentos.

El modelo bidimensional puede mejorarse considerando el hecho, observado experimentalmente, de que cuando las proteínas no están ligadas al protofilamento, no consumen

ATP. Por lo tanto, la fuerza externa, que modela la energía suministrada al sistema por medio del ATP, debería anularse fuera del filamento.

Por último, hace falta llevar a cabo un análisis de la eficiencia de los motores brownianos estudiados en el presente trabajo.

Apéndice A

Detalles de la deducción de la ecuación de Fokker-Planck

En este apéndice se presenta el procedimiento desarrollado por Chandrasekhar [31] para la deducción de la ecuación de Fokker-Planck, partiendo de la ecuación de Langevin

$$\gamma \frac{dx(t)}{dt} = -\frac{dV(x)}{dx} + f_s(t) + F_e(t) \quad (\text{A.1})$$

y de la ecuación para la fuerza externa aleatoria

$$\frac{dF_e(t)}{dt} = -\frac{F_e(t)}{\tau_e} + \zeta(t). \quad (\text{A.2})$$

Cada una de estas ecuaciones contiene un término aleatorio, f_s y ζ , cuyas relaciones de autocorrelación están dadas por

$$\langle f_s(t)f_s(t') \rangle = 2\gamma kT\delta(t-t') \quad (\text{A.3})$$

y

$$\langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = \frac{f_0^2}{\tau_e^2}\delta(t-t'), \quad (\text{A.4})$$

respectivamente.

Dicho procedimiento consiste en hallar la probabilidad de transición

$$\psi(x, F_e; \Delta x, \Delta F_e; t) \quad (\text{A.5})$$

de que en un intervalo de tiempo Δt , x y F_e sufran un incremento de

$$\Delta x = x(t + \Delta t) - x(t) \quad (\text{A.6})$$

y

$$\Delta F_e = F_e(t + \Delta t) - F_e(t) \quad (\text{A.7})$$

respectivamente. Aquí se supone que Δt es suficientemente grande para que no exista correlación entre $f_s(t)$ y $f_s(t + \Delta t)$ y entre $\zeta(t)$ y $\zeta(t + \Delta t)$, que varían rápidamente, pero tal que $\frac{dV(x)}{dx}$ y F_e , que varían más lentamente, puedan ser aproximadas por constantes durante este intervalo de tiempo.

A continuación, el objetivo es encontrar la función de distribución $\mathcal{W}(x, F_e; t + \Delta t)$, que gobierna la probabilidad de ocurrencia de x y F_e al tiempo $t + \Delta t$, a partir de la distribución $\mathcal{W}(x, F_e; t)$ al tiempo t y del conocimiento de la mencionada probabilidad de transición $\psi(x, F_e; \Delta x, \Delta F_e)$. Esto es posible a través de la expresión

$$\begin{aligned} \mathcal{W}(x, F_e; t + \Delta t) = & \quad (\text{A.8}) \\ \int \int \mathcal{W}(x - \Delta x, F_e - \Delta F_e; t) \psi(x - \Delta x, F_e - \Delta F_e; \Delta x, \Delta F_e; t) d\Delta x d\Delta F_e, \end{aligned}$$

conocida como ecuación de Chapman-Kolmogorov [29, 31]. Esta ecuación es válida siempre y cuando se trate de un proceso markoviano que, como se ha visto, es el caso para $\mathcal{W}(x, F_e; t)$.

Para comenzar con la deducción, se integra la ec.(A.1) de t a $t + \Delta t$,

$$\int_t^{t+\Delta t} \frac{dx(t')}{dt} dt' = \frac{1}{\gamma} \int_t^{t+\Delta t} \left(-\frac{dV(x)}{dx} \right) dt' + \frac{1}{\gamma} \int_t^{t+\Delta t} F_e(t') dt' + \frac{1}{\gamma} \int_t^{t+\Delta t} f_s(t') dt'. \quad (\text{A.9})$$

Tomando en cuenta que en el intervalo Δt las fuerzas $\frac{dV(x)}{dx}$ y F_e , pueden ser aproximadas por constantes y definiendo $\Delta x = x(t + \Delta t) - x(t)$ se llega a que

$$\Delta x + \frac{1}{\gamma} \frac{dV(x)}{dx} \Delta t - \frac{1}{\gamma} F_e(t) \Delta t = B_x(\Delta t) \quad (\text{A.10})$$

donde,

$$B_x(\Delta t) = \frac{1}{\gamma} \int_t^{t+\Delta t} f_s(t') dt' \quad (\text{A.11})$$

se define, del mismo modo que se hace en la ref.[31]. La cantidad $B_x(\Delta t)$ representa el cambio en la posición de la partícula browniana debido a las colisiones recibidas durante el intervalo de tiempo Δt .

Si ahora se integra la ecuación correspondiente a F_e , ec.(A.2), y se hacen las mismas consideraciones sobre $\zeta(t)$, que tiene las mismas propiedades que $f_s(t)$, se llega a que:

$$\Delta F_e + \frac{F_e}{\tau_e} \Delta t = B_{F_e}(\Delta t), \quad (\text{A.12})$$

donde se ha definido $\Delta F_e = F_e(t + \Delta t) - F_e(t)$ y

$$B_{F_e}(\Delta t) = \int_t^{t+\Delta t} \zeta_x(t') dt'. \quad (\text{A.13})$$

Tomando las ecs.(A.10) y (A.12), y suponiendo que las distribuciones de probabilidad tiendan a distribuciones maxwellianas cuando $t \rightarrow \infty$, se llega a que la probabilidad de ocurrencia de los diferentes valores de $\bar{B}(\Delta t) = (B_x(\Delta t), B_{F_e}(\Delta t))$, está gobernada por la función de distribución [31]

$$\omega(\bar{B}(\Delta t)) = N e^{\left(-\frac{B_x^2}{2\sigma_x^2} - \frac{B_{F_e}^2}{2\sigma_{F_e}^2}\right)}, \quad (\text{A.14})$$

donde N es la constante de normalización. Se normaliza para obtener esta constante, es decir,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \omega(\bar{B}(\Delta t)) dB_x dB_{F_e} = 1, \quad (\text{A.15})$$

con lo que se llega a que

$$N = \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_{F_e}} \quad (\text{A.16})$$

Mediante la función de distribución, ec.(A.14), se puede demostrar que los primeros momentos, $\langle B_x \rangle$ y $\langle B_{F_e} \rangle$, son cero. Del mismo modo se calculan los segundos momentos, obteniéndose

$$\begin{aligned} \langle B_x^2 \rangle &= N \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} B_x^2 e^{\left(-\frac{B_x^2}{2\sigma_x^2} - \frac{B_{F_e}^2}{2\sigma_{F_e}^2}\right)} dB_x dB_{F_e} \\ &= 2\pi N \sigma_x^3 \sigma_{F_e} \\ &= \sigma_x^2, \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

y de manera equivalente,

$$\langle B_{F_e}^2 \rangle = \sigma_{F_e}^2 \quad (\text{A.18})$$

Para encontrar los valores de σ_x y σ_{F_e} , se calculan los mismos momentos, pero ahora usando las relaciones de autocorrelación, ec.(A.3) y ec.(A.4) y la definición de B_x y B_{F_e} , de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \langle B_x^2 \rangle &= \left\langle \frac{1}{\gamma^2} \int_t^{t+\Delta t} f_s(t') dt' \int_t^{t+\Delta t} f_s(t'') dt'' \right\rangle \\ &= \frac{1}{\gamma^2} \int_t^{t+\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} 2\gamma kT \delta(t' - t'') dt' dt'' \\ &= \frac{2kT}{\gamma} \Delta t. \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

y,

$$\begin{aligned}
\langle B_{F_e}^2 \rangle &= \int_t^{t+\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \langle f_s(t') f_s(t'') \rangle dt' dt'' \\
&= \int_t^{t+\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \frac{f_o^2}{\tau_e^2} \delta(t' - t'') dt' dt'' \\
&= \frac{f_o^2}{\tau_e^2} \Delta t,
\end{aligned} \tag{A.20}$$

Resumiendo,

$$\langle B_x^2 \rangle = \sigma_x^2 = \frac{2kT}{\gamma} \Delta t, \tag{A.21}$$

$$\langle B_{F_e}^2 \rangle = \sigma_{F_e}^2 = \frac{f_o^2}{\tau_e^2} \Delta t. \tag{A.22}$$

Substituyendo estos resultados, además de la ec.(A.10) y la ec.(A.12), en la función de probabilidad, ec.(A.14), se llega a que la función de probabilidad de transición es

$$\psi(x, F_e; \Delta x, \Delta F_e; t) = C e^{A_1(x, F_e, t)} e^{A_2(x, F_e, t)}, \tag{A.23}$$

donde

$$\begin{aligned}
C &= \sqrt{\frac{\gamma \tau_e^2}{8\pi^2 kT f_o^2 \Delta t^2}}, \\
A_1(x, F_e, t) &= \left(-\frac{|\Delta x + \frac{1}{\gamma} \frac{dV(x)}{dx} \Delta t - \frac{1}{\gamma} F_e(t) \Delta t|^2}{4kT \Delta t / \gamma} \right), \\
A_2(x, F_e, t) &= \left(-\frac{|\Delta F_e + \frac{F_e}{\tau_e} \Delta t|^2}{2f_o^2 \Delta t / \tau_e^2} \right).
\end{aligned}$$

Una vez hallada la probabilidad de transición, ahora se requiere encontrar la función de distribución $W(x, F_e; t + \Delta t)$, que gobierna la probabilidad de ocurrencia de x y F_e al tiempo $t + \Delta t$, a partir de la distribución $W(x, F_e; t)$ al tiempo t y del conocimiento de la probabilidad de transición $\psi(x, F_e; \Delta x, \Delta F_e)$ de que x y F_e sufran un incremento Δx y ΔF_e en un tiempo Δt . Esto es posible a través de la ecuación de Chapman-Kolmogorov, ec.(A.8), antes mencionada.

Se expanden en series de Taylor las cantidades $W(x, F_e; t + \Delta t)$, $W(x - \Delta x, F_e - \Delta F_e; t)$ y $\psi(x - \Delta x, F_e - \Delta F_e; \Delta x, \Delta F_e; t)$ en la ec.(A.8), y se escribe la expresión en términos de los promedios definidos por

$$\langle \Delta x \rangle = \int \Delta x \psi d\Delta x d\Delta F_e. \tag{A.24}$$

Se toma en cuenta que x , F_e , Δx y ΔF_e son variables independientes entre y se desarrolla obteniéndose

$$\begin{aligned} \frac{\partial W}{\partial t} \Delta t = & -\frac{\partial}{\partial x} (W \langle \Delta x \rangle) - \frac{\partial}{\partial F_e} (W \langle \Delta F_e \rangle) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (W \langle \Delta x^2 \rangle) \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial F_e^2} (W \langle \Delta F_e^2 \rangle) + \frac{\partial^2}{\partial x \partial F_e} (W \langle \Delta x \Delta F_e \rangle). \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

Esta es la ecuación de Fokker-Planck para una partícula browniana sujeta a un potencial conservativo y a una fuerza externa, aleatoria, dependiente del tiempo y correlacionada en su forma general. Si se calculan los promedios involucrados en esta ecuación utilizando la definición, ec.(A.24), y la probabilidad de transición, ec.(A.23), se puede demostrar que estos promedios obedecen las siguientes ecuaciones

$$\langle \Delta x \rangle = \left(\frac{F_e}{\gamma} + \frac{V_o K}{\gamma \lambda} \right) \Delta t \quad (\text{A.26})$$

$$\langle \Delta x^2 \rangle = \left(\frac{F_e}{\gamma} + \frac{V_o K}{\gamma \lambda} \right)^2 \Delta t^2 + \frac{2kT}{\gamma} \Delta t \quad (\text{A.27})$$

$$\langle \Delta F_e \rangle = -\frac{F_e}{\tau_e} \Delta t \quad (\text{A.28})$$

$$\langle \Delta F_e^2 \rangle = \frac{f_o^2}{\tau_e^2} \Delta t + \frac{F_e}{\tau_e} \Delta t^2 \quad (\text{A.29})$$

$$\langle \Delta x \Delta F_e \rangle = -\frac{F_e}{\tau_e} \left(\frac{F_e}{\gamma} + \frac{V_o K}{\gamma \lambda} \right) \Delta t^2 \quad (\text{A.30})$$

Si ahora se substituyen los promedios en la ec.(A.25), se divide entre Δt y se calcula el límite $\Delta t \rightarrow 0$, se llega a que la ecuación de Fokker-Planck para el problema en cuestión es

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{W}(x, F_e, t) = & \left[-\frac{1}{\gamma} F_e \frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{dV(x)}{dx} + kT \frac{\partial}{\partial x} \right) \right. \\ & \left. + \frac{1}{\tau_e} \frac{\partial}{\partial F_e} \left(F_e + \frac{f_o^2}{2\tau_e} \frac{\partial}{\partial F_e} \right) \right] \mathcal{W}(x, F_e, t). \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

Apéndice B

Código del programa en una dimensión

A continuación se muestra el código del programa en una dimensión para la ecuación de Langevin con un potencial tipo matraca y una fuerza externa aleatoria y correlacionada.

```
PROGRAM p1d_v10
c-----INICIO-----
c  Inicializacion de variables y arreglos
    IMPLICIT INTEGER (i-n)
    IMPLICIT DOUBLE PRECISION (a-h,o-z)
    CHARACTER*20 A,AA,AD,B,BD,C,CD,D,DD,E,ED,F,G,H,HDX
    DIMENSION xprom(200000)
    DIMENSION dxprom(200000)
    DIMENSION dcmedia(200000)
    DIMENSION x2prom(200000)
    DIMENSION dx2prom(200000)
    DIMENSION fextxprom(200000)
    DIMENSION dfextxprom(200000)
    DIMENSION fextx2prom(200000)
    DIMENSION dfextx2prom(200000)
    DIMENSION fcanxprom(200000)
    DIMENSION dfcanxprom(200000)
    DIMENSION xfextxprom(200000)
    DIMENSION dxfextxprom(200000)
```

```

        DIMENSION xfcxprom(200000)
        DIMENSION fexfcxprom(200000)
        DIMENSION dfcxrxfexprom(200000)
        DIMENSION dfcxrxfcxprom(20000)
        DIMENSION d2fcxrxprom(200000)
c   Apertura y lectura de datos de entrada
        OPEN(UNIT=8, FILE='in_a')
        OPEN(UNIT=9, FILE='in_b')
        READ(8,*) v0,rkT,f0,text
        READ(9,*) idum01
        READ(9,*) dt,nsystems,nciclos
        READ(9,*) x0
c   Definicion de constantes
        ndat=10000
        nsubsystems=100
        nsubciclos=nciclos/ndat
        desp=0.13812d0
        pi=3.14159265358979d0
        dospi=2.0d0*pi
        cuatropi=4.0d0*pi
        seispi=6.0d0*pi
        emenos=DEXP(-dt/text)
        unomenose=1.0d0-emenos
        Cs=dSQRT(2.0d0*rkT*dt)
        Cvx=dospi*v0*dt
        Cext=f0*dSQRT(dt*dt*dt)/text
        Cext2=f0*dSQRT(dt)
        idum1=-idum01*1000
        idum2=-idum01*1000-1000
c   Inicializacion t=0
        do i = 1,ndat
            xprom(i)=0.0d0

```

```

dxprom(i)=0.0d0
x2prom(i)=0.0d0
dx2prom(i)=0.0d0
dcmedia(i)=0.0d0
fextxprom(i)=0.0d0
dfextxprom(i)=0.0d0
fextx2prom(i)=0.0d0
dfextx2prom(i)=0.0d0
fcanxprom(i)=0.0d0
dfcanxprom(i)=0.0d0
xfextxprom(i)=0.0d0
dxfextxprom(i)=0.0d0
xfcanxprom(i)=0.0d0
fexfcxprom(i)=0.0d0
dfcxrxfexprom(i)=0.0d0
dfcxrxfcxprom(i)=0.0d0
d2fcxrpxprom(i)=0.0d0
end do
c Inicio de ciclo para los diferentes ensambles sobre los que
c se va a promediar.
DO 20 iii=1,nsystems
  idum1=idum1-10
  idum3=idum3-10
c Inicializacion de tiempo y posiscion para cada Ensamble
  t=0.0d0
  x=x0
c Calculo de las fuerzas para la primera vuelta
c previo al proceso de iteracion
  DC2Pix=DCOS(dospi*(x+desp))
  DC4Pix=DCOS(cuatropi*(x+desp))
  DC6Pix=DCOS(seispi*(x+desp))
  DS2Pix=DSIN(dospi*(x+desp))

```

```

        DS4Pix=DSIN(cuatropi*(x+desp))
        DS6Pix=DSIN(seispi*(x+desp))
c PARA X
c Fuerza externa
        fextx=0.0d0
c Fuerza debida al potencial
        fcanx=Cvx*(DC2Pix+(0.8)*DC4Pix+(0.6)*DC6Pix)
c Fuerza termica
        CALL GAUDIST2(idum2,zeta2)
        fsx=Cs*zeta2
c Se inicia proceso de iteracion
        DO 10 i = 1,ndat
        DO 5 j = 1,nsubciclos
c Calculo de x y t
        t = t + dt
        xa = x
        fcanxa=fcanx
        fextxa=fextx
        x = x + fsx + fcanx + fextx
        dx = (x-xa)/dt
        dx2 = (x*x-xa*xa)/dt
c Recalculo de la fuerzas para el resto de los ciclos
c Fuerza externa
        CALL GAUDIST1(idum1,zeta1)
        fextx = fextx*emenos + Cext2*zeta1*unomenose
c Fuerzas debidas al potencial
        DC2Pix=DCOS(dospi*(x+desp))
        DC4Pix=DCOS(cuatropi*(x+desp))
        DC6Pix=DCOS(seispi*(x+desp))
        DS2Pix=DSIN(dospi*(x+desp))
        DS4Pix=DSIN(cuatropi*(x+desp))
        DS6Pix=DSIN(seispi*(x+desp))

```

```

        fcanx=Cvx*(DC2Pix+(0.8)*DC4Pix+(0.6)*DC6Pix)
c   Fuerza termica
        CALL GAUDIST2(idum2,zeta2)
        fsx=Cs*zeta2
c   Calculo de las derivadas de las fuerzas y sus productos
        dfextx = (fextx-fextxa)/dt
        dfextx2 = (fextx*fextx-fextxa*fextxa)/dt
        dfcanx = (fcanx-fcanxa)/dt
        dxfextx = (x*fextx-xa*fextxa)/dt
        dfcanrx=-dospi*Cvx*(DS2Pix+(1.6)*DS4Pix+(1.8)*DS6Pix)
d2fcanrx=-cuatropi*pi*Cvx*(DC2Pix+(3.2)*DC4Pix+(5.4)*DC6Pix)
5       END DO
c   Escritura de la posicion para los promedios
        xprom(i) = xprom(i) + x
        dxprom(i) = dxprom(i) + dx
        x2prom(i) = x2prom(i) + x*x
        dx2prom(i) = dx2prom(i) + dx2
        fextxprom(i) = fextxprom(i) + fextx/dt
        dfextxprom(i) = dfextxprom(i) + dfextx/dt
        fextx2prom(i) = fextx2prom(i) + fextx*fextx/(dt*dt)
        dfextx2prom(i) = dfextx2prom(i) + dfextx2/(dt*dt)
        fcanxprom(i) = fcanxprom(i) + fcanx/dt
        dfcanxprom(i) = dfcanxprom(i) + dfcanx/dt
        xfextxprom(i) = xfextxprom(i) + x*fextx/dt
        dxfextxprom(i) = dxfextxprom(i) + dxfextx/dt
        xfcanxprom(i) = xfcanxprom(i) + x*fcanx/dt
        fexfcxprom(i) = fexfcxprom(i) + fcanx*fextx/(dt*dt)
        dfcxrfcxprom(i)=dfcxrfcxprom(i)+dfcanrx*fextx/(dt*dt)
        dfcxrfcxprom(i)=dfcxrfcxprom(i)+dfcanrx*fcanx/(dt*dt)
        d2fcxrxprom(i) = d2fcxrxprom(i) + d2fcanrx/dt
c   Calculo del desplazamiento cuadratico medio.
        dcmedia(i) = dcmedia(i) + (x-x0)*(x-x0)

```

```
10      END DO
20      END DO
      A='r2'
      OPEN(7, FILE=A)
      AD='dr2'
      OPEN(8, FILE=AD)
      B='fext'
      OPEN(9, FILE=B)
      BD='dfext'
      OPEN(10, FILE=BD)
      C='fext2'
      OPEN(11, FILE=C)
      CD='dfext2'
      OPEN(12, FILE=CD)
      D='fcan'
      OPEN(13, FILE=D)
      DD='dfcan'
      OPEN(14, FILE=DD)
      E='rfext'
      OPEN(15, FILE=E)
      ED='drfext'
      OPEN(16, FILE=ED)
      F='rfcan'
      OPEN(17, FILE=F)
      G='fetc'
      OPEN(18, FILE=G)
      H='dx'
      OPEN(19, FILE=H)
      HDX='dfcrx'
      OPEN(20, FILE=HDX)
      AA='dcm'
      OPEN(21, FILE=AA)
```

c Calculo de los promedios y escritura

```
do i = 1,ndat
  t = float(i)*dt*nsubciclos
  xpt = xprom(i)/float(nsystems)
  dxpt = dxprom(i)/float(nsystems)
  x2pt = x2prom(i)/float(nsystems)
  dx2pt = dx2prom(i)/float(nsystems)
  dcm = dcmedia(i)/float(nsystems)
  fexpt = fextxprom(i)/float(nsystems)
  dfexpt = dfextxprom(i)/float(nsystems)
  fex2pt = fextx2prom(i)/float(nsystems)
  dfex2pt = dfextx2prom(i)/float(nsystems)
  fcxpt = fcanxprom(i)/float(nsystems)
  dfcxpt = dfcanxprom(i)/float(nsystems)
  xfexpt = xfextxprom(i)/float(nsystems)
  dxfexpt = dxfextxprom(i)/float(nsystems)
  xfcxpt = xfcanaxprom(i)/float(nsystems)
  fefcxpt = fefcaxprom(i)/float(nsystems)
  dfcxrxfexpt = dfcxrxfexprom(i)/float(nsystems)
  dfcxrxfcxpt = dfcxrxfcxprom(i)/float(nsystems)
  d2fcxrxpt = d2fcxrxprom(i)/float(nsystems)
  if(i.eq.1) then
    print *,t,xpt,v0,rkT
  else
    if(i.eq.2) then
      print *,t,xpt,f0,text
    else
      if(i.eq.3) then
        print *,t,xpt,dt,nsystems,nciclos
      else
        print *,t,xpt
      end if
    end if
  end if
```

```
        end if
    end if
    write(7,*)x2pt
    write(8,*)dx2pt
    write(9,*)fexpt
    write(10,*)dfexpt
    write(11,*)fex2pt
    write(12,*)dfex2pt
    write(13,*)fcxpt
    write(14,*)dfcxpt
    write(15,*)xfexpt
    write(16,*)dxfexpt
    write(17,*)xfcxpt
    write(18,*)fefcxpt
    write(19,*)dxpt
    write(20,*)dfcxrxfexpt,dfcxrxfcxpt,d2fcxrxfexpt
    write(21,*)dcm
end do
STOP
END
c FIN del programa principal
```

Apéndice C

Código del programa en dos dimensiones

A continuación se muestra el código del programa en dos dimensiones para la ecuación de Langevin con un potencial filamento y una fuerza externa aleatoria y correlacionada.

```
PROGRAM p2d_v10
c-----INICIO-----
c  Inicializacion de variables y arreglos
  IMPLICIT INTEGER (i-n)
    IMPLICIT DOUBLE PRECISION (a-h,o-z)
    CHARACTER*20 A1,A2,A3,A4,A5,A6,A7,A8
    DIMENSION xprom(100000),yprom(100000)
    DIMENSION xnube(10,2000),ynube(10,2000)
    DIMENSION dcmedia(100000)
    DIMENSION dcmediax(100000)
    DIMENSION dcmediay(100000)
    DIMENSION nsystemscan(100000)
    DIMENSION nsystemsout(100000)
    DIMENSION xpromcan(100000), ypromcan(100000)
    DIMENSION xpromout(100000), ypromout(100000)
    DIMENSION tcanhist(10000),touthist(10000)
    DIMENSION inube(10)
c  Apertura y Lectura de datos de entrada
    OPEN(UNIT=8, FILE='in_a')
```

```

OPEN(UNIT=9, FILE='in_b')
READ(8,*) v0,rkT,f0,text
READ(9,*) idumo1
READ(9,*) v1,sigma
READ(9,*) dt,nsystems,nciclos
READ(9,*) x0,y0
do i=1,10
    READ(9,*) inu
    inube(i)=inu
end do
c Definicion de constantes
ndat=10000
nsubciclos=int(nciclos/ndat)
desp=0.13812d0
pi=3.14159265358979d0
dospi=2.0d0*pi
cuatropi=4.0d0*pi
seispi=6.0d0*pi
emenos=DEXP(-dt/text)
unomenose=1.0d0-emenos
Cs=dSQRT(2.0d0*rkT*dt)
Cvx=dospi*v0*dt
Cvy=-2*v0*dt/sigma
Cext=f0*dSQRT(dt*dt*dt)/text
Cext2=f0*dSQRT(dt)
idum1=-idumo1*1000
idum2=-idumo1*1000-1000
idum3=-idumo1*1000-2000
idum4=-idumo1*1000-3000
c Inicializacin
do i = 1,10000
    tcanhist(i)=0.0d0

```

```

        touthist(i)=0.0d0
    end do
do i = 1,ndat
    xprom(i)=0.0d0
    yprom(i)=0.0d0
    xpromcan(i)=0.0d0
    xpromout(i)=0.0d0
    ypromcan(i)=0.0d0
    ypromout(i)=0.0d0
    nsystemscan(i)=0
    nsystemsout(i)=0
    dcmedia(i)=0.0d0
    dcmediax(i)=0.0d0
    dcmediay(i)=0.0d0
end do
c Inicio de realizacion para una particula (nsystems)
DO 20 iii=1,nsystems
    idum1=idum1-10
    idum3=idum3-10
    idum2=idum2-10
    idum4=idum4-10
c Inicializacion para cada particula
    t=0.0d0
    nnube=1
    tcan=0.0d0
    tout=0.0d0
    ntcn=1
    ntout=0
    x=x0
    y=y0
c Calculo de funciones para el potencial
    DC2Pix=DCOS(dospi*(x+desp))

```

```

        DC4Pix=DCOS(cuatropi*(x+desp))
        DC6Pix=DCOS(seispi*(x+desp))
        expy=EXP(-(y*y)/sigma)
        DS2Pix=DSIN(dospi*(x+desp))
        DS4Pix=DSIN(cuatropi*(x+desp))
        DS6Pix=DSIN(seispi*(x+desp))
c     PARA X
c     Fuerza externa con condicion inicial = 0
        fextx=0.0d0
c     Fuerza debida al potencial filamento
        fcanx=Cvx*expy*(DC2Pix+(0.8)*DC4Pix+(0.6)*DC6Pix)
c     Fuerza termica
        CALL GAUDIST2(idum2,zeta2)
        fsx=Cs*zeta2
c     PARA Y
c     Fuerza externa con condicion inicial = 0
        fexty=0.0d0
c     Fuerza debida al potencial filamento
        fcany=Cvy*y*expy*(v1/v0
                +(DS2Pix+(0.4)*DS4Pix+(0.2)*DS6Pix))
c     Fuerza termica
        CALL GAUDIST4(idum4,zeta4)
        fsy=Cs*zeta4
c Se inicia proceso de iteracion para cada particula
        DO 10 i = 1,ndat
            DO 5 j = 1,nsubciclos
c         Calculo de x, y y t
                t = t + dt
                xa = x
                ya = y
                x = x + fsx + fcanx + fextx
                y = y + fsy + fcany + fexty

```

```

c   Recalculo de la fuerzas para el resto de los ciclos
c   Fuerzas externas aleatorias para x y y
      CALL GAUDIST1(idum1,zeta1)
      fextx = fextx*emenos + Cext2*zeta1*unomenose
      CALL GAUDIST3(idum3,zeta3)
      fexty = fexty*emenos + Cext2*zeta3*unomenose
c   Fuerzas debidas al potencial para x y y
c   y sus correspondientes funciones.
      DC2Pix=DCOS(dospi*(x+desp))
      DC4Pix=DCOS(cuatropi*(x+desp))
      DC6Pix=DCOS(seispi*(x+desp))
      expy=EXP(-(y*y)/sigma)
      DS2Pix=DSIN(dospi*(x+desp))
      DS4Pix=DSIN(cuatropi*(x+desp))
      DS6Pix=DSIN(seispi*(x+desp))
      fcanx=Cvx*expy*(DC2Pix+(0.8)*DC4Pix+(0.6)*DC6Pix)
      fcany=Cvy*y*expy*(v1/v0+(DS2Pix+(0.4)*DS4Pix
          +(0.2)*DS6Pix))
c   Fuerzas termicas para x y y
      CALL GAUDIST2(idum2,zeta2)
      fsx=Cs*zeta2
      CALL GAUDIST4(idum4,zeta4)
      fsy=Cs*zeta4
c   Tiempos de la residencia dentro y fuera del canal
      if (y.gt.-2.5.and.y.lt.2.5) then
        if (ntcan.eq.ntout) then
          inttout=int(tout)
          touthist(inttout)=touthist(inttout)+1
          tout=0.0d0
          ntcant=ntcant+1
        end if
      tcan=tcan+dt

```

```

        else
            if (ntcan.gt.ntout) then
                inttcan=int(tcan)
                tcanhist(inttcan)=tcanhist(inttcan)+1
                tcan=0.0d0
                ntout=ntout+1
            end if
            tout=tout+dt
        end if
5      END DO
c      Posicion promedio y desplazamiento cuadratico medio
        xprom(i) = xprom(i) + x
        yprom(i) = yprom(i) + y
        dcmedia(i) = dcmedia(i)+(x-x0)*(x-x0)+(y-y0)*(y-y0)
        dcmediax(i) = dcmediax(i) + (x-x0)*(x-x0)
        dcmediay(i) = dcmediay(i) + (y-y0)*(y-y0)
c      Posicion y numero de las particulas en el filamento
        if (y.gt.-2.5.and.y.lt.2.5) then
            nsystemscan(i)=nsystemscan(i)+1
            xpromcan(i)=xpromcan(i)+x
            ypromcan(i)=ypromcan(i)+y
        else
            nsystemsout(i)=nsystemsout(i)+1
            xpromout(i)=xpromout(i)+x
            ypromout(i)=ypromout(i)+y
        end if
c      Registro de nubes de particulas
        if (i.eq.inube(nnube)) then
            xnube(nnube,iii)=x
            ynube(nnube,iii)=y
            nnube=nnube+1
        end if

```

```

10      END DO
20      END DO
c      Tiempo de residencia para histograma
      if (ntcan.eq.ntout) then
          inttout=int(tout)
          touthist(inttout)=touthist(inttout)+1
      else
          inttcan=int(tcan)
          tcanhist(inttcan)=tcanhist(inttcan)+1
      end if
c      Apertura de archivos
      A1='rcanin'
      OPEN(20, FILE=A1)
      A2='rcanout'
      OPEN(21, FILE=A2)
      A3='dcm'
      OPEN(22, FILE=A3)
      A5='tc'
      OPEN(30, FILE=A5)
      A6='to'
      OPEN(31, FILE=A6)
c      Calculo de los promedios y escritura
c      del archivo de datos de salida
      do i = 1,ndat
          t = float(i*nsubciclos)*dt
          xpt = xprom(i)/float(nsystems)
          ypt = yprom(i)/float(nsystems)
          if(nsystemscan(i).eq.0) then
              xptcan = 0
              yptcan = 0
          else
              xptcan = xpromcan(i)/float(nsystemscan(i))

```

```

        yptcan = ypromcan(i)/float(nsystemscan(i))
    end if
    if(nsystemsout(i).eq.0) then
        xptout = 0
        yptout = 0
    else
        xptout = xpromout(i)/float(nsystemsout(i))
        yptout = ypromout(i)/float(nsystemsout(i))
    end if
    dcm = dcmedia(i)/float(nsystems)
    dcmx = dcmediax(i)/float(nsystems)
    dcmy = dcmediay(i)/float(nsystems)
    if(i.eq.1) then
        print *,t,xpt,ypt,v0,v1,sigma
    else
        if(i.eq.2) then
            print *,t,xpt,ypt,rkT,f0,text
        else
            if(i.eq.3) then
                print *,t,xpt,ypt,nsystems
            else
                print *,t,xpt,ypt
            end if
        end if
    end if
    write(20,*)nsystemscan(i),xptcan,yptcan
    write(21,*)nsystemsout(i),xptout,yptout
    write(22,*)dcm,dcmx,dcmy
end do
do i=1,1000
    write(30,*)i,tcanhist(i)
    write(31,*)i,touthist(i)

```

```

    end do
c  Escritura de los archivos de nubes
    do i=1,10
        A4='Nube'//CHAR(i+47)//'.15'
        OPEN(25, FILE=A4)
        do ii=1,nsystems
            xnubef=xnube(i,ii)
            ynubef=ynube(i,ii)
            write(25,*)inube(i),ii,xnubef,ynubef
        end do
    end do
    A7='nubex'
    OPEN(27, FILE=A7)
    A8='nubey'
    OPEN(28, FILE=A8)
    write(27,*)xnube
    write(28,*)ynube
    STOP
END
c FIN del programa principal

```


Apéndice D

Generador de números pseudo-aleatorios

A continuación se muestra la subrutina correspondiente al los generadores de números pseudo-aleatorios gaussianos utilizados para el cálculo de las fuerzas térmicas y externas.

```
subroutine gaudist1(idum,xx)
  implicit integer (i-n)
  implicit double precision (a-h,o-z)
  xx = gasdev1(idum)
  return
end
```

```
function gasdev1(idum)
  implicit integer (i-n)
  implicit double precision (a-h,o-z)
  save iset,gset
  data iset/0/
  if(iset.eq.0)then
1   v1 = 2.0*ran1(idum) - 1.0
   v2 = 2.0*ran1(idum) - 1.0
   r = v1**2 + v2**2
   if(r.ge.1.0.or.r.eq.0.0) go to 1
   fac = sqrt(-2.0*log(r)/r)
   gset = v1*fac
```

```

gasdev1 = v2*fac
iset = 1
    else
gasdev1 = gset
iset = 0
    end if
    return
end

function ran1(idum)
    integer idum,ia,im,iq,ir,ntab,ndiv
    double precision ran1,am,eps,rnm
    parameter (ia=16807,im=2147483647,
               am=1.0/im,iq=127773,ir=2836)
    parameter (ntab=32,ndiv=1+(im-1)/ntab,
               eps=1.2d-7,rnm=1.0-eps)
    integer j,k,iv(ntab),iy
    save iv,iy
    data iv /ntab*0/, iy /0/
    if(idum.le.0.or.iy.eq.0) then
idum = max(-idum,1)
do j = ntab+8,1,-1
    k = idum/iq
    idum = ia*(idum-k*iq)-ir*k
    if(idum.lt.0) idum = idum+im
    if(j.le.ntab) iv(j)=idum
end do
iy = iv(1)
    end if
    k = idum/iq
    idum = ia*(idum-k*iq) - ir*k
    if(idum.lt.0) idum = idum + im

```

```
j = 1 + iy/ndiv
iy = iv(j)
iv(j) = idum
ran1 = min(am*iy, rnmX)
return
end
```


Bibliografía

- [1] B. Alberts, A. Johnson, J. Lewis, M. Raff, K. Roberts, and P. Walter. *The molecular biology of the cell*. Garland, New York, 4th edition, 2002.
- [2] M. Smoluchowski. Experimentell nachweisbare, der ublichen thermodynamik widersprechende molekularphaenomene. *Physik Zeitschr*, 13:1069, 1912.
- [3] R.P. Feynman, R.B. Leighton, and M. Sands. *The Feynman Lectures on Physics, Vol 1, chapter 46*. Addison Wesley, Reading MA, 1963.
- [4] M.O. Magnasco. Forced thermal ratchets. *Phys. Rev. Lett.*, 71(10):1477, 1993.
- [5] C.R. Doering, W. Horsthemke, and J. Riordan. Non equilibrium fluctuation-induced transport. *Phys. Rev. Lett.*, 72(19):2984, 1994.
- [6] M.M. Millonas and M.I. Dykman. Transport and current reversal in stochastically driven ratchets. *Phys. Lett. A*, 185:65, 1994.
- [7] R.D. Astumian and M. Bier. Fluctuation driven ratchets: molecular motors. *Phys. Rev. Lett.*, 72(11):1766, 1994.
- [8] M.O. Magnasco. Molecular combustion motors. *Phys. Rev. Lett.*, 72:2656, 1993.
- [9] R. Bartussek, P. Reimann, and P. Hanggi. Precise numerics versus theory for correlation ratchets. *Phys. Rev. Lett.*, 76(7):1166, 1996.
- [10] L. A. Ibarra-Bracamontes and V. Romero-Rochin. Stochastic ratchets with colored thermal noise. *Phys. Rev. E*, 56(4):4048, 1997.
- [11] L. Viana and V. Romero-Rochin. Characteristic times and current inversion in inertial ratchets with colored thermal noise. *Physica D*, 168:193, 2002.

- [12] P. Reimann. Brownian motors: noisy transport far from equilibrium. *Phys. Rep.*, 2(10):237, 2001.
- [13] P. Hänggi, F. Marchesoni, and F. Nori. Brownian motors. *Ann. Phys.*, 14(1-3):51, 2005.
- [14] J.L. Mateos. Chaotic transport and current reversal in deterministic ratchets. *Phys. Rev. Lett.*, 84(2):258, 2000.
- [15] S. Cilla and L.M. Floría. A two dimensional model for kinesin and dynein stepping along microtubules. *Il Nuovo Cimento D*, 20(11):1761, 1998.
- [16] M. Kostur and L. Schimansky-Geier. Numerical study of diffusion induced transport in 2D systems. *Phys. Lett. A*, 265:337, 2000.
- [17] J.D. Bao and T.J. Zhao. Langevin simulation approach to a two-dimensional coupled flashing ratchet. *Phys. Lett. A*, 239(4):228, 1998.
- [18] J.D. Bao. Nonmonotonic behavior of mobility in a multidimensional overdamped periodic system. *Phys. Rev. E*, 62(4):4606, 2000.
- [19] T.J. Zhao, Y.Z. Zhuo, Y. Zhan, Q. Yi, and T.G. Cao. Two-dimensional ratchets with non-conservative impulsive force. *Mod. Phys. Lett. B*, 16(26):999, 2002.
- [20] R. Eichhorn, P. Reimann, and P. Hanggi. Absolute negative movility and current reversals of a meandering brownian particle. *Physica A*, 325:101, 2003.
- [21] K. Svoboda, C. Smith, B.J. Schnapp, and S. Block. Direct observation of kinesin stepping by optical trapping interferometry. *Nature*, 365(721), 1993.
- [22] Z. Wang and M.P. Sheetz. The c-terminus of tubulin increases cytoplasmic dynein and kinesin processivity. *Biophys. J.*, 78:1955, 2000.
- [23] B. Trinczek, A. Ebnet, E.M. Mandelkow, and E. Mandelkow. Tau regulates the attachment/detachment but not the speed of motors in microtubule-dependent transport of single vesicles and organelles. *J. Cell Science*, 112, 1999.
- [24] M.J. Schnitzer and S. Block. Kinesin hydrolyses one atp per 8-nm step. *Nature*, 388(386), 1997.

- [25] R. Bartussek. *Ratchets driven by colored gaussian noise. En:Lecture on stochastic dynamics*. Springer, Berlin, 1st edition, 1997.
- [26] G. Gallavotti. *Statistical Mechanics, A Short Treatise*. Springer Verlag, Berlin, 1st edition, 1999.
- [27] A. Einstein. *Investigations on the theory of the Brownian Movement*. Dover, New York, 1st edition, 1956.
- [28] J. Perrin. La discontinuité de la matiere. *Revue du mois*, 1:323, 1906.
- [29] N.G. van Kampen. *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*. North Holland, Amsterdam, 1st edition, 1992.
- [30] C. Kittel. *Elementary Statistical Physics*. John Wiley, Berlin, 1st edition, 1958.
- [31] S. Chandrasekhar. Stochastic Problems in Physics and Astronomy. *Rev. Mod. Phys.*, 15:1–89, 1943.
- [32] H. Risken. *The Fokker-Planck Equation*. Springer, New York, 1st edition, 1984.
- [33] L. A. Ibarra Bracamontes. Un modelo de motores moleculares en el régimen browniano con ruido térmico de color. Tesis de Maestría en Ciencias (Física) Facultad de Ciencias, 1998.
- [34] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, and B.P. Flannery. *Numerical Recipes in FORTRAN: The art of Scientific Computing*. Cambridge Univ. Press., New York, 2nd edition, 1992.
- [35] W.H. Press and S.A. Teukolsky. Portable random number generators. *Comp. in Phys.*, 6(522), 1992.
- [36] J.L. Mateos. Current reversals in deterministic ratchets: points and dimers. *Phys. D*, 168:205, 2002.
- [37] B. Lindner L. Shimansky-Geier P. Reimann P. Hanggi and M. Nagaoka. Inertia ratchets: A numerical study versus theory. *Phys. Rev. E*, 59(2):1417, 1999.

- [38] R. Lipowsky, S. Klumpp, and T. M. Nieuwenhuizen. Random walks of cytoskeletal motors in open and closed compartments. *Phys. Rev. Lett.*, 87(10):108101, 2001.
- [39] R. Lipowsky, S. Klumpp, and T. M. Nieuwenhuizen. Walks of molecular motors in two and three dimensions. *Europhys. Lett.*, 58(3):468, 2002.
- [40] H.A. Kramers. Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions. *Physica*, 7:284, 1940.
- [41] P. Hänggi, P. Talkner, and M. Borkovec. Reaction rate theory: fifty years after kramers. *Rev. Mod. Phys.*, 7:284, 1990.
- [42] E. Sparre-Andersen. On the fluctuations of sums of random variables. *Math. Scand.*, 1:263, 1953.
- [43] S. Redner. *A guide to first passage processes*. Cambridge University Press, Cambridge, 2001.