



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE  
MÉXICO

---

FACULTAD DE CIENCIAS

PARTÍCULAS AUTOPROPULSADAS:  
EFECTOS DE POTENCIALES CON  
ESTRUCTURAS JERÁRQUICAS

T E S I S

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:

**Físico**

PRESENTA:

**Braulio Farid Antonio Chi**

TUTOR:

Dr. Francisco Javier Sevilla Pérez



Ciudad de México, 2018



Universidad Nacional  
Autónoma de México



**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.



## **Hoja de datos del jurado**

### **1. Datos del alumno**

Antonio

Chi

Braulio Farid

9831133896

Universidad Nacional Autónoma de México

Facultad de Ciencias

Física

414049783

### **2. Datos del tutor**

Dr.

Francisco Javier

Sevilla

Pérez

### **3. Datos del sinodal 1**

Dr.

Rolando Crisóstomo

Castillo

Caballero

### **4. Datos del sinodal 2**

Dr.

José Ines

Jiménez

Aquino

### **5. Datos del sinodal 3**

Dr.

Alejandro

Vásquez

Arzola

### **6. Datos del sinodal 4**

Dr.

Ricardo Atahualpa

Solórzano

Kraemer

### **7. Datos del trabajo escrito**

Partículas autopropulsadas: efectos de potenciales con estructuras jerárquicas

86 p

2018



A MIS PADRES,  
QUIENES HAN ABIERTO TODOS LOS CAMINOS  
POR LOS QUE HE ANDADO



# Agradecimientos

---

A mi asesor, el Dr. Francisco Javier Sevilla Pérez, por todo su tiempo y valiosos comentarios.

Al Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) de la UNAM IN114717 Materia activa: modelos de movimiento y fenómenos colectivos, y a la DGAPA-UNAM por la beca recibida



# Resumen

---

La materia activa comprende un gran número de agentes caracterizados por ser capaces de extraer energía de su entorno y, mediante grados de libertad internos, convertirla en energía cinética de autopropulsión. Debido a este continuo consumo de energía, los sistemas de materia activa se encuentran intrínsecamente en un estado de no equilibrio termodinámico. Esta definición general engloba sistemas en varias escalas: 1) microscópicas, como bacterias y partículas artificiales y 2) macroscópicas, como manadas de mamíferos, aves en migración y cardúmenes de peces, entre otros. En esta tesis se estudian aquellos sistemas activos que por su tamaño y su interacción con el medio en el que se mueven, denominamos sistemas coloidales activos. Nos interesan particularmente sistemas que poseen patrones característicos de nado en un medio acuoso: velocidad de autopropulsión y longitud de persistencia del nado en una dirección dada. El modelo empleado en este estudio, es el llamado modelo *run and tumble* el cual considera partículas que se mueven en cierta dirección a lo largo de una longitud de persistencia (*run*) antes de cambiar abruptamente de dirección (*tumble*). En este trabajo, el movimiento del agente externo está caracterizado por una restricción energética debido a la presencia de un potencial externo. Dado que los cambios de dirección se consideran aleatorios, el modelo *run and tumble* describe formalmente una caminata aleatoria (*random walk*) de la cual podemos saber su distribución de probabilidad espacial, la cual, gracias a la presencia del confinamiento debido a potenciales externos puede ser estacionaria (independiente del tiempo) permitiendo establecer una analogía entre procesos difusivos Brownianos y procesos *run and tumble*. Nuestra meta principal es describir las distribuciones de probabilidad cuando se tiene potenciales de atrapamiento que presenten rugosidad (típicamente oscilaciones senoidales superpuestas en un potencial armónico). El estudio de las funciones de distribución incluye entender la relación entre dinámica *run and tumble* y difusión Browniana en medios no homogéneos, la dependencia de la distribución con respecto a los parámetros de nado y restricción energética y de la estructura misma de los potenciales rugosos.



# Índice general

---

Índice de figuras	xI
<b>1. Introducción.</b>	
<b>Materia activa y movimiento Browniano</b>	<b>1</b>
1.1. Movimiento Browniano . . . . .	6
1.1.1. Movimiento Browniano sin potencial externo . . . . .	9
1.1.2. Movimiento Browniano en el régimen sobreamortiguado . . . . .	15
1.2. Run & Tumble . . . . .	18
1.2.1. Soluciones estacionarias . . . . .	26
1.2.2. Adimensionalización de las ecuaciones . . . . .	31
1.3. Puntos atractores, repulsores y condiciones de estabilidad . . . . .	32
<b>2. Movimiento activo confinado por un potencial armónico</b>	<b>35</b>
2.1. Temperatura y potencial efectivos . . . . .	35
2.2. Distribución de probabilidad . . . . .	37
<b>3. Movimiento activo confinado por un potencial biestable asimétrico</b>	<b>41</b>
3.1. Distribución de probabilidad . . . . .	45
<b>4. Potenciales con estructura jerárquica I: Potencial de Zwanzig</b>	<b>49</b>
4.1. Temperatura y potenciales efectivos en el potencial de Zwanzig . . . . .	51
4.2. Difusión y temperatura promedio . . . . .	56
4.2.1. Comparación entre difusión promedio ( <i>run and tumble</i> ) y difusión Browniana (activa y pasiva) . . . . .	57
<b>5. Potenciales con estructura jerárquica II: Fuerza tipo Weierstrass</b>	<b>61</b>
5.1. Difusión promedio en función de la rugosidad . . . . .	70
<b>6. Conclusiones</b>	<b>73</b>

## ÍNDICE GENERAL

---

<b>A. Integración numérica de la ecuación de Langevin</b>	<b>77</b>
A.1. Pseudocódigo . . . . .	78
A.2. Código . . . . .	79
<b>Bibliografía</b>	<b>83</b>

# Índice de figuras

---

1.1.	Ejemplos de partículas que presentan movimiento Browniano activo. Éstos son organismos biológicos u objetos artificiales capaces de tomar energía del ambiente y convertirlo en movimiento dirigido. Sus escalas (mostradas en el eje $x$ ) varían entre lo microscópico y nanoscópico y sus velocidades de propulsión (mostradas en el eje $y$ ) son típicamente hasta de un milímetro por segundo. Las letras en el diagrama corresponden a micronadadores artificiales listados en el artículo de Bechinger (1). Fuente: Rev. Mod. Phys. 88, 045006 <a href="https://doi.org/10.1103/RevModPhys.88.045006">https://doi.org/10.1103/RevModPhys.88.045006</a> . . . . .	4
1.2.	Perfiles instantáneos de una simulación de partículas (flechas negras) bajo el modelo de Vicsek, (izquierda) con perturbación pequeña $\eta = 0.1$ en el cálculo de las velocidades existe un rompimiento de simetría rotacional lo cual hace que las partículas se mueven en una dirección preferente y (derecha) grandes perturbaciones $\eta = 0.8$ las partículas se mueven en direcciones no correlacionadas traduciéndose en una isotropía espacial. El círculo rojo en el centro de cada figura indica el radio tomado en cuenta para tomar primeros vecinos. Fuente: Reka, A, Barabasi, Statistical Mechanics of Complex Networks, Review of Modern Physics, (2002), 74, 47 - 97	5
1.3.	Partícula coloidal inmersa en un medio conformado por partículas con movimientos en direcciones aleatorias (flechas grises) inducen movimiento errático (flechas negras). . . . .	7
1.4.	Esquema de la velocidad (panel izquierdo) en un proceso dicotómico y la trayectoria continua (panel derecho) que produce. Como puede observarse, la velocidad toma solo dos valores $\xi(t)/c = \pm 1$ ( $c$ es la velocidad de la partícula) y es discontinua; sin embargo la trayectoria $x(t)$ asociada si presenta continuidad. . . . .	19

## ÍNDICE DE FIGURAS

---

1.5.	Sitios en una malla discreta en los cuales puede moverse una partícula activa. En azul se muestra la trayectoria de la partícula moviéndose a la derecha y que en el tiempo $t - \tau$ ha continuado en su misma dirección. En rojo, la partícula proveniente de la izquierda ha cambiado su dirección en el mismo tiempo. Ambas partículas llegan al punto $j$ y representan la contribución a $P_R$ . La contribución de $P_L$ se bosqueja de manera similar. . . . .	20
1.6.	(a) Potencial de doble pozo donde C es metaestable relativo a A. (b) La sección BD ha sufrido un calentamiento de manera que el perfil del potencial en D es comparable con el potencial en B, lo cual produce una metaestabilidad en A relativa a la estabilidad de C. . . . .	29
2.1.	Funciones de distribución de $x$ , calculados analíticamente y mediante simulaciones moleculares para distintos valores de $g_2 g_1^2$ . . .	38
3.1.	La posición relativa y profundidad de los mínimos del potencial (puntos) dependen fuertemente del parámetro de asimetría, teniendo un potencial biestable simétrico cuando $a = 0$ . . . . .	42
3.2.	Perfil de temperaturas para distintos valores de $a$ y $g_1$ . A medida que $g_1$ disminuye, el mínimo global de la temperatura efectiva se acerca más a cero. Esto sugiere que existe un $g_1$ mín para el cual este mínimo de la temperatura se mantiene positivo. . . . .	43
3.3.	Potencial efectivo para el doble pozo asimétrico con distintos valores de $a$ , $g_1$ y $g_2$ . Las tres gráficas del panel superior corresponden a un valor de asimetría $a = 0.01$ y las tres gráficas del panel inferior corresponden a valores de $a = 0.5$ . De izquierda a derecha cada gráfica presenta valores ascendentes de $g_1$ como múltiplos de $g_1$ mínimos. . . . .	44
3.4.	Perfiles de probabilidad para distintos valores de $a$ , $g_1$ y $g_2$ . Las gráficas en el panel superior tiene valores de $a = 0.01$ y las del panel inferior, $a = 0.5$ . Para ambos paneles a medida que $g_1$ crece (de izquierda a derecha) la asimetría decrece. . . . .	46
3.5.	Distribuciones de probabilidad obtenidas de la integración de la ecuación de Langevin (izquierda). Distribución del tiempo del primer pasaje de los puntos críticos al origen (derecha). Los marcadores +, representan el tiempo promedio de primer pasaje desde el punto metaestable al origen y los marcadores $\times$ , del punto estable al origen. La gráfica embebida indica la separación de ambos promedios como función de los valores de $g_2$ de las acotaciones (el código de color coincide). . . . .	47

4.1. Potencial rugoso de Zwanzig . . . . .	50
4.2. Valores máximos y mínimos de $x$ como función de $g_1$ (gráfica semilog en $g_1$ ). . . . .	52
4.3. Vista del potencial en el intervalo $(x_{\text{mín}}, x_{\text{máx}})$ , donde la temperatura efectiva es positiva. . . . .	53
4.4. Perfiles de temperatura para distintos valores de $g_1$ . Observamos grandes oscilaciones y dominios pequeños para valores de $g_1$ comparables con $g_1$ mín y pequeñas oscilaciones en grandes dominios para $g_1$ mayores que el valor mínimo. . . . .	53
4.5. Transiciones de máximos a mínimos del potencial efectivo como función de los valores críticos de $g_2$ y la distribución de probabilidad asociada. . . . .	54
4.6. Cambio global de la geometría del potencial efectivo como función de $g_2 g_1^2$ y su función de probabilidad asociada. . . . .	55
4.7. Difusión promedio como función de $g_2$ para distintos valores de $g_1$ . Escala logarítmica en ambos ejes. Las líneas punteadas en ambas gráficas representan valores de movimiento Browniano libre. . . . .	57
4.8. Difusión activa y pasiva de un ensamble Browniano. La línea punteada púrpura indica el valor de $(g_1 g_2)^{-1}$ y la línea punteada amarilla, $\langle D \rangle$ . . . . .	58
5.1. Potencial con estructura jerárquica, $p = 3$ , $\alpha = 0.75$ y $\beta = 9$ . . . . .	62
5.2. Función de Weierstrass truncada con $p = 15$ , $\alpha = 0.45$ , $\beta = 13$ . . . . .	63
5.3. Valores máximos y mínimos de $x$ como función de $g_1$ (escala logarítmica en el eje $g_1$ ) para el potencial jerárquico. . . . .	64
5.4. Perfiles de temperatura para $a = 0.1$ (panel superior), y $a = 0.9$ (panel inferior). . . . .	64
5.5. Perfil del potencial efectivo para distintos valores de $g_2$ . Para $g_2 < g_2^{c1}$ todos los mínimos del potencial externo son máximos locales del potencial efectivo. Para $g_2 > g_2^{c68}$ , los mínimos del potencial externo y potencial efectivo coinciden. . . . .	65
5.6. Distribución de probabilidad teórica (izquierda) y distribución de probabilidad a partir de integración de la ecuación de Langevin (derecha) en escala logarítmica en $P(x)$ . . . . .	66
5.7. Perfiles del potencial efectivo para $a = 0.1$ (panel superior) y $a = 0.9$ (panel inferior) para mismos valores de $g_1$ que en la figura 5.4. . . . .	66
5.8. Perfiles de las funciones de distribución para $a = 0.1$ (panel superior) y $a = 0.9$ (panel inferior) para mismos valores de $g_1$ que en la figura 5.7 . . . . .	67
5.9. Difusión promedio y temperatura efectiva promedio dependientes de $g_1$ y $g_2$ para distintas amplitudes $a$ . . . . .	68

## ÍNDICE DE FIGURAS

---

- 5.10. Difusión activa y pasiva de un ensamble Browniano. La línea punteada púrpura indica el valor de  $(g_1 g_2)^{-1}$  y la línea punteada amarilla,  $\langle D \rangle$ . . . . . 69
- 5.11. Código de color: **Negro**: Potencial armónico, **Anaranjado**: Doble pozo asimétrico,  $a = 0.1$ , **Amarillo**: Doble pozo asimétrico,  $a = 0.9$ , **Morado**: Potencial de Zwanzig, **Escarlata**: Potencial de Weierstrass,  $a = 0.1$ , **Rojo**: Potencial de Weierstrass,  $a = 0.9$ . . . . . 71

## Introducción.

# Materia activa y movimiento Browniano

---

El objetivo de esta tesis es observar los efectos de rugosidades en un potencial externo sobre una partícula autopropulsada. Para ello emplearemos el modelo *run and tumble*, con el cual se describirán propiedades estadísticas de ensambles de partículas autopropulsadas a bajos números de Reynolds, en términos de lo que al final de este capítulo llamamos parámetros de nado:  $g_1 = vL/(\mu\epsilon)$  y  $g_2 = \epsilon/(k_B T_0)$ ; donde  $v$  es una velocidad característica de autopropulsión de las partícula,  $\mu$  es su movilidad en el medio donde se propulsan y  $k_B$  es la constante de Boltzmann. Los valores de  $L$  y  $\epsilon$  se relacionan con el potencial externo y típicamente representan que a una distancia  $L$  del origen, la energía de confinamiento toma un valor  $\epsilon$ . Finalmente, el valor de  $T_0$  proviene de la velocidad de nado,  $v$ , y la tasa de cambios de dirección,  $\alpha$ , ( $T_0 \propto v^2/\alpha$ ). Mostraremos la derivación de esta relación en la segunda mitad de este capítulo. Entre las propiedades de las partículas que estudiamos se encuentran la función de distribución espacial que describe a los ensambles de partículas bajo los distintos potenciales externos, así como la difusión y temperatura inhomogéneos que se definen dentro del modelo al suponer equilibrio local.

Cabe mencionar que el modelo *run and tumble* y en general, las partículas autopropulsadas, se encuentran descritos dentro del campo de la materia activa y a su vez tienen una relación cercana con la teoría del movimiento Browniano. Por ello en la primera mitad de la introducción se describe en términos generales qué es la materia activa y conceptos relevantes de la teoría del movimiento Browniano y en la segunda mitad, se derivan las ecuaciones del modelo *run and tumble* y se muestra su relación con el movimiento Browniano.

## 1. INTRODUCCIÓN.

### MATERIA ACTIVA Y MOVIMIENTO BROWNIANO

---

La materia activa comprende un gran número de agentes<sup>1</sup> caracterizados por ser capaces de extraer energía de su entorno y, mediante grados de libertad internos, convertirla en energía cinética de autopropulsión. Debido a este continuo consumo de energía, los sistemas de materia activa se encuentran intrínsecamente en un estado de no equilibrio termodinámico (2).

Esta definición general engloba sistemas en varias escalas, microscópicas, como bacterias y partículas artificiales y macroscópicas, como manadas de mamíferos, aves en migración y cardúmenes de peces, entre otros. Además, se tienen agentes de diversos constituyentes: organismos vivos, compuestos orgánicos, partículas artificiales; los cuales actúan individualmente o en conjuntos; y que son estudiados desde la biología, química y física; experimental y teóricamente.

Uno de los ejemplos de relevancia debido a sus potenciales aplicaciones son los sistemas coloidales. Dichos sistemas están conformados por microorganismos y partículas artificiales, capaces de generar un movimiento sistemático propio, dependiente o independiente del medio circundante; sin embargo, debido a sus dimensiones características de  $\sim 1\mu\text{m} - 10^3\mu\text{m}$  (1), las colisiones aleatorias con el medio circundante evitan un movimiento balístico, haciendo necesario un tratamiento estadístico que tome en cuenta tanto la dinámica del nado de las partículas como el medio acuoso en que se encuentran. Más adelante, observaremos que la teoría del movimiento Browniano sienta algunas de las bases en la descripción de la actividad de las partículas autopropulsadas.

Gran variedad de bacterias son motiles debido a la presencia de cilios o flagelos, donde motores proteicos responden a la concentración de sustancias químicas: sustratos alimenticios o agentes tóxicos para las bacterias; generando un movimiento dirigido por quimiotaxis<sup>2</sup> (3, 4). Dichos estudios sobre el movimiento bacteriano han despertado el interés de sintetizar partículas microscópicas capaces de emular dichas dinámicas al interactuar con su ambiente. La propulsión suele provenir de distintos mecanismos, tal es el caso de las partículas Janus (en analogía con el dios romano ambivalente) (5, 6, 7, 8, 9), las cuales son partículas cuyas superficies poseen dos propiedades físicas o químicas distintas. En concreto, se han sintetizado partículas de geometrías esféricas constituidas por aleaciones de oro y platino (10) y cilíndricas, cuyas cubiertas están constituidas por oro y rubidio (5); incluso aleaciones más complejas consistentes en microesferas con núcleos de magnesio y nanopartículas de oro recubiertas con óxido de titanio (11); todas ellas con la característica de ser asimétricas en su composición y cuyos mecanismos de propulsión pueden ser catálisis de oxígeno en la superficie de Platino en un medio acuoso de  $\text{H}_2\text{O}_2$  provocando autodifusioforesis<sup>3</sup>; calentamiento local del extremo

---

<sup>1</sup> Entendiéndose organismos vivos, microscópicos o macroscópicos o partículas artificiales.

<sup>2</sup> Movimiento dirigido por un gradiente de concentración química.

<sup>3</sup> Movimiento espontáneo de partículas coloidales en un fluido debido a diferencias de concentración locales de las mismas partículas.

---

de oro en una disolución acuosa, resultando en termoforesis<sup>1</sup>, o empuje por creación de burbujas a partir de la reacción química entre agua y magnesio, entre otros. En la figura 1.1 se muestra un compendio de partículas activas coloidales, tanto biológicas como artificiales, mostrando sus tamaños y velocidades de nado características.

Independientemente de la naturaleza de la materia activa (biológico o artificial), del medio de propulsión (quimiotaxis, termoforesis, autodifusioforesis) y de su origen en la microescala (motilidad<sup>2</sup> debido a motores proteicos, calentamientos locales por radiación externa, empuje mecánico por burbujas), es de interés proponer un modelo teórico capaz de predecir el comportamiento estadístico de sus propiedades macroscópicas, como la difusión, y el acumulamiento espacial en el medio en el que se mueven.

Por otra parte, las propiedades emergentes de grandes sistemas de materia activa son el foco de investigación en la macroescala. Entendiendo por propiedad emergente a comportamientos, que ausentes para agentes individuales, aparecen espontáneamente cuando se tiene un colectivo de ellos, dependiendo fuertemente del número de individuos que forman al sistema y las interacciones entre ellos. Observamos propiedades emergentes en el movimiento colectivo de aves, en los cardúmenes de peces o en el movimiento migratorio de manadas de animales terrestres, los cuales se caracterizan por una autoorganización<sup>3</sup> no presente en los agentes individuales (en este caso, los animales que conforman los grupos) o en muy bajas concentraciones. (12). Uno de los primeros modelos dados que recuperan propiedades del movimiento colectivo de animales, observado en la naturaleza, es el modelo de Vicsek (13). Este modelo se introdujo para investigar la emergencia de movimiento autoorganizado en sistemas de entidades con interacciones móviles basadas en mecanismos biológicos. La dinámica introducida supone que las partículas se mueven a una velocidad de magnitud constante y a cada paso de tiempo se supone que la dirección de la velocidad es el promedio de las direcciones de sus primeros  $n$  vecinos más una perturbación aleatoria (*random noise*,  $\eta$ ). El modelo es capaz de reproducir una transición de fase cinética (extendiendo el uso del término transición de fase a sistemas de no equilibrio) de ausencia de transporte (velocidad promedio cero  $\langle v \rangle = 0$ ) a transporte neto debido a un rompimiento de simetría rotacional. En la figura 1.2 se presentan perfiles instantáneos de una simulación de partículas activas bajo el modelo de Vicsek, donde puede observarse el comportamiento de “enjambre” (*swarm beha-*

---

<sup>1</sup>Movimiento dirigido por un gradiente de temperatura.

<sup>2</sup>Habilidad de un organismo vivo de moverse por sí mismo usando energía proveniente de su metabolismo.

<sup>3</sup>Proceso en el que alguna forma de orden global emerge a partir de interacciones locales entre los componentes de un sistema inicialmente desordenado. Ejemplos incluyen: magnetización espontánea, plegamiento espontáneo de proteínas y formación de parvadas de aves.

1. INTRODUCCIÓN.  
MATERIA ACTIVA Y MOVIMIENTO BROWNIANO

---

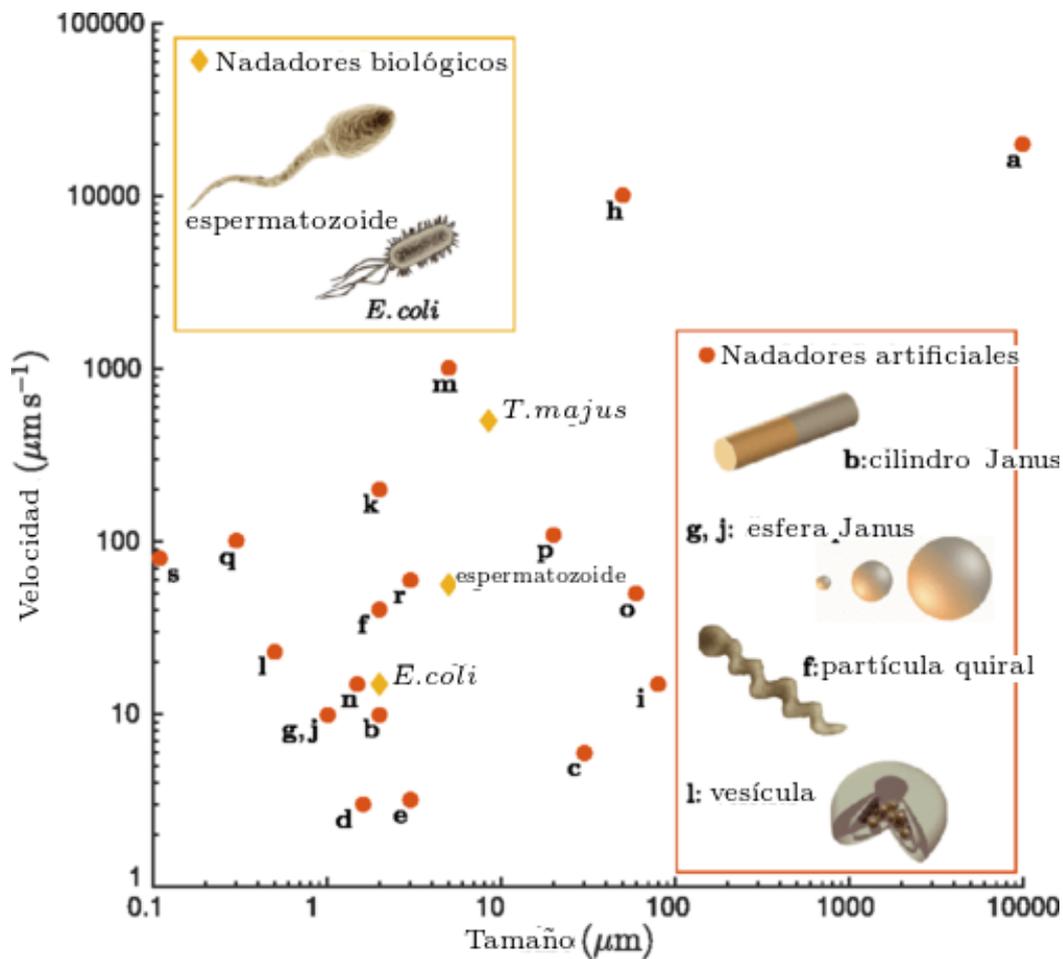


Figura 1.1: Ejemplos de partículas que presentan movimiento Browniano activo. Éstos son organismos biológicos u objetos artificiales capaces de tomar energía del ambiente y convertirlo en movimiento dirigido. Sus escalas (mostradas en el eje  $x$ ) varían entre lo microscópico y nanoscópico y sus velocidades de propulsión (mostradas en el eje  $y$ ) son típicamente hasta de un milímetro por segundo. Las letras en el diagrama corresponden a micronadadores artificiales listados en el artículo de Bechinger (1). Fuente: Rev. Mod. Phys. 88, 045006 <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.88.045006>

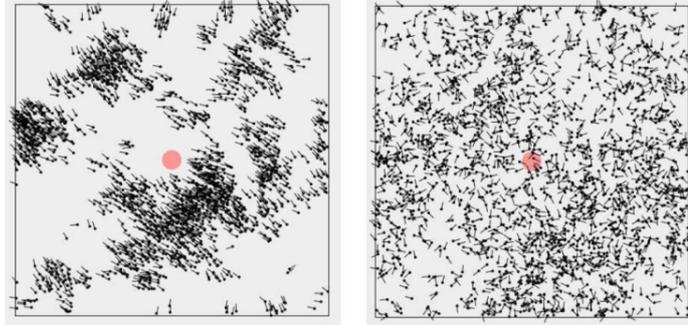


Figura 1.2: Perfiles instantáneos de una simulación de partículas (flechas negras) bajo el modelo de Vicsek, (izquierda) con perturbación pequeña  $\eta = 0.1$  en el cálculo de las velocidades existe un rompimiento de simetría rotacional lo cual hace que las partículas se mueven en una dirección preferente y (derecha) grandes perturbaciones  $\eta = 0.8$  las partículas se mueven en direcciones no correlacionadas traduciéndose en una isotropía espacial. El círculo rojo en el centro de cada figura indica el radio tomado en cuenta para tomar primeros vecinos. Fuente: Reka, A, Barabasi, Statistical Mechanics of Complex Networks, Review of Modern Physics, (2002), 74, 47 - 97

*vior* o *swarming*) proveniente de la interacción entre las partículas del sistema, traduciéndose en anisotropía espacial a causa de los cúmulos de partículas.

Este trabajo se enfocará en la descripción de las partículas activas coloidales. Como se mencionó, la materia activa es un campo de estudio suficientemente amplio para dar cabida a muy diversos enfoques teóricos. El modelo aquí estudiado es el modelo *run and tumble*, un modelo prototípico que explica la dinámica de microorganismos bacterianos autopropulsados (14, 15). El modelo *run and tumble* puede clasificarse dentro de los modelos de “dinámica individual” pues no incluye interacciones entre distintas partículas activas sino únicamente la autopropulsión y su interacción con el medio exterior (potencial externo o fronteras rígidas). En este modelo, se caracteriza a las partículas autopropulsadas mediante: 1) su tendencia a moverse a una velocidad característica (consecuencia de su propulsión), de ahí que se emplee el término *run* (correr) y por 2) su tendencia de “persistencia”, es decir, de mantener cierta dirección de movimiento durante algún intervalo de tiempo antes de realizar un cambio de dirección (*tumble*). Entre los aspectos tratables se encuentra la difusión de sistemas activos bajo distintos potenciales, la cual en contraste con el movimiento Browniano y como veremos más adelante, no está asociada al desplazamiento cuadrático medio del sistema.

La motivación y descripción del modelo, así como sus límites, serán descritos más adelante en este capítulo. No obstante, es importante mencionar desde ahora, que en este modelo se definirá una temperatura local, en general no constante en el espacio, para un sistema activo, la cual está directamente ligada a la relación de

Einstein para el coeficiente de difusión de una partícula que presenta movimiento Browniano. Esta relación establece que el coeficiente de difusión ( $D$ ) de dicha partícula es proporcional a la temperatura del medio ( $T$ ) en el que se difunde, y la constante de proporcionalidad es la movilidad de la partícula en el medio ( $\mu$ ) por la constante de Boltzmann ( $k_B$ ),  $D = \mu k_B T$ .

La validez de la definición de una temperatura efectiva en la dinámica *run and tumble* recae en un elemento fundamental de la teoría del movimiento Browniano: la ecuación de Langevin, la cual describe la dinámica de una partícula con movimiento Browniano mediante las ecuaciones de Newton y la presencia de una fuerza estocástica; esta última, siendo una fuerza efectiva que modela el efecto promedio de las colisiones con partículas del medio. En la siguiente sección se discutirán los aspectos importantes del movimiento Browniano, necesarios para comprender la relación entre el coeficiente de difusión y la temperatura del medio que aparece en la ecuación de Langevin.

## 1.1. Movimiento Browniano

La teoría del movimiento Browniano es quizás el acercamiento más simple a la dinámica de sistemas fuera de equilibrio termodinámico. Denominamos movimiento Browniano al movimiento aleatorio de pequeñas partículas ( $\sim 1\mu\text{m}$ ) inmersas en un fluido de densidad similar (en órdenes de magnitud) a la de la partícula. Al tener estas partículas coloidales inmersas en un medio cuyos constituyentes tienen movimientos de agitación con los que impactan a la partícula coloidal de una forma inhomogénea (instantáneamente), obtenemos dos efectos principales que pueden tratarse por separado. Por un lado, un frenado debido a la fuerza de fricción neta ejercida por el medio (Ley de Stokes) y por otra parte, un empuje debido a fluctuaciones locales en la tasa de colisiones con el medio. La ecuación que describe ambos efectos es la llamada ecuación de Langevin, la cual contiene fuerzas de fricción y fuerzas aleatorias. Más adelante, mencionaremos que proponer una naturaleza estocástica en las colisiones está justificado por las distintas escalas de tiempo características presentes en un sistema solvente-coloide (medio y partículas que se difunden en él).

Históricamente, las primeras investigaciones realizadas fueron llevadas a cabo por Robert Brown quien en 1827 (16) observó granos de polen inmersos en un líquido. Inicialmente planteó la hipótesis de que se trataba de microorganismos vivos; sin embargo, repitiendo los experimentos con materiales granulares y silicatos determinó su naturaleza puramente física y notó que dichas partículas presentan movimiento erráticos aún sin fuerzas externas actuando.

Posteriormente, en 1863 el origen del movimiento perpetuo de las partículas

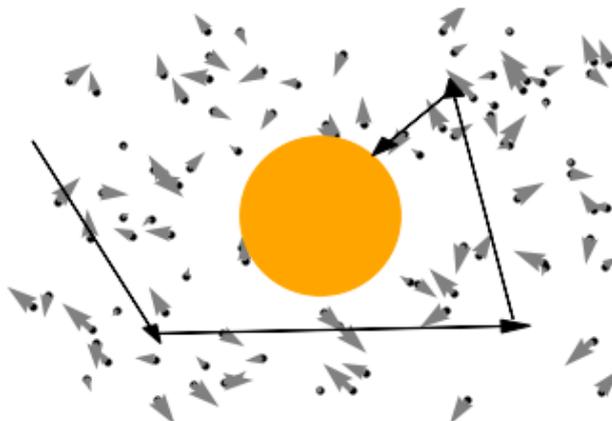


Figura 1.3: Partícula coloidal inmersa en un medio conformado por partículas con movimientos en direcciones aleatorias (flechas grises) inducen movimiento errático (flechas negras).

observadas por Brown fue asociado con el movimiento de las moléculas del líquido circundante por C. Wiener, quien conocía la teoría cinética de Maxwell (17).

No fue sino hasta inicios del siglo XX cuando A. Einstein (18), M. Smoluchowski (19) y P. Langevin (20) entre otros, mostraron teóricamente que el comportamiento de las partículas con movimiento Browniano puede ser descrito por colisiones estocásticas entre las partículas y su medio circundante.

El origen de dichas fuerzas estocásticas proviene de un tratamiento efectivo de las colisiones de la partícula en suspensión (partícula que presenta movimiento Browniano) con el medio. Consideremos una partícula coloidal inmersa en un fluido cuyos constituyentes son mucho más pequeños comparados con la partícula suspendida. El radio  $a$  típico de una partícula capaz de presentar movimiento Browniano varía en los órdenes de  $2.5 \times 10^{-9} \text{m} < a < 5 \times 10^{-6} \text{m}$  en sistemas coloidales (14). Por ello, el movimiento de la partícula suspendida es considerablemente más lento que el de los átomos o moléculas circundantes, resultando en una serie de rápidas colisiones debido a la fluctuación de densidad en el fluido. La escala de tiempo en el que ocurren dichas colisiones son del orden de  $\tau_s \approx 10^{-12} \text{s}^1$ , mientras que el tiempo de relajación de la velocidad en el movimiento Browniano es aproximadamente:

<sup>1</sup>Tomando la distancia intermolecular del agua  $d \approx 2.8 \text{Å}$  (obtenida de su función de correlación radial) el tiempo de recorrido antes de una colisión es  $\tau_s = d / \sqrt{2RT/M} \approx 0.46 \times 10^{-12} \text{s}$  donde  $m_a \approx 20 \text{g mol}^{-1}$  es la masa molar de las moléculas del medio y  $R = 8.31 \text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$ , la constante de gas ideal y  $T = 300 \text{K}$ . El factor  $\sqrt{2RT/M}$  es una velocidad típica de una molécula en condiciones de gas ideal debido a agitación térmica.

## 1. INTRODUCCIÓN.

### MATERIA ACTIVA Y MOVIMIENTO BROWNIANO

---

$$\tau_B = \frac{m}{\gamma} \approx 10^{-6} \text{ s}, \quad (1.1)$$

donde  $m$  es la masa de la partícula en régimen Browniano y  $\gamma$ , la fricción con el medio (ver ecuación 1.3). En efecto, para una partícula de radio  $a = 5 \times 10^{-6} \text{ m}$  y densidad  $\rho = 2.5 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3}$  (en los límites superiores de tamaño y densidad) suspendida en agua, cuya viscosidad es  $\eta = 8.9 \times 10^{-4} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$  (a  $T = 298.15 \text{ K}$ ) se tiene  $\tau_B = m/(6\pi\eta a) \approx 1.6 \times 10^{-6} \text{ s}$  (ver ecuación 1.3). Esta escala proviene directamente de la integración del movimiento cuadrático medio mencionado en la siguiente subsección, pero que en pocas palabras establece la división entre lo que consideramos tiempos cortos para una partícula en suspensión ( $t \ll \tau_B$ ) y tiempos largos ( $t \gg \tau_B$ ), los cuales se traducen a un cambio en la difusión que sigue la partícula en su medio. Es precisamente la diferencia en escalas temporales la que da origen a un aparente movimiento aleatorio en el movimiento Browniano. Supongamos un intervalo de tiempo  $dt$  pequeño comparado con  $\tau_B$ , es decir,  $dt \approx 10^{-8} \text{ s}$ , en dicho intervalo hay aproximadamente  $dt/\tau_s \approx 10^4$  colisiones con las moléculas del líquido, por lo tanto, es conveniente expresar dichas colisiones como una contribución efectiva a la fuerza a la que está sometida la partícula en suspensión, lo cual sugiere un salto del régimen determinista al régimen estocástico.

Más adelante se explicará a detalle las propiedades de dicha fuerza estocástica; sin embargo cabe mencionar que el tratamiento efectivo de la fuerza debe mantener el equilibrio energético entre partículas y el medio. Dicho equilibrio está expresado por el teorema de fluctuación disipación (FD). Este teorema establece en el caso de movimiento Browniano que una partícula, al moverse en un fluido experimenta una fuerza de arrastre, donde este arrastre disipa energía cinética de la partícula en suspensión, convirtiéndola en calor (disipación). Este calor se convierte en energía térmica en el medio circundante, provocando mayores colisiones entre medio y suspensión, resultando de esta transferencia de energía, el movimiento Browniano (fluctuación).

Puede observarse cierta analogía entre el estudio del movimiento Browniano con el estudio de la materia activa. La identificación del fenómeno físico ocurre primeramente de forma experimental, en condiciones poco vinculadas con la física y gracias a caracterizaciones rigurosas experimentales pudo llegar a darse una explicación dentro del seno de la física estadística, la cual resulta no ser única. Los esfuerzos actuales realizados en la investigación de la materia activa comprenden estudios experimentales y teóricos, donde los segundos pueden resultar en gran variedad de descripciones equivalentes.

### 1.1.1. Movimiento Browniano sin potencial externo

Volviendo a la descripción de la dinámica Browniana, el razonamiento seguido por Langevin fue que, mientras que el movimiento Browniano de una partícula coloidal luce aleatorio, no hay motivo para pensar que no puede ser descrito con las ecuaciones de movimiento clásicas para cualquier otro sistema dinámico, ya sea en el formalismo Newtoniano, Lagrangiano o Hamiltoniano, si se toman en cuenta todos los grados de libertad. Por lo que propuso un tratamiento efectivo de la contribución del medio (fricción y empuje) dentro de las ecuaciones de movimiento ya conocidas. Por simplicidad consideraremos un movimiento unidimensional, aunque es posible generalizar los resultados a tres dimensiones de manera directa. La ecuación de Newton correspondiente a una partícula de masa  $m$  y velocidad  $v(t)$  en un medio viscoso es:

$$m \frac{dv(t)}{dt} = F(t), \quad (1.2)$$

donde  $F(t)$  es la fuerza total ejercida instantáneamente sobre la partícula al tiempo  $t$ . Esta fuerza contiene todas las interacciones de la partícula en suspensión con el medio circundante; sin embargo, no es posible dar una expresión exacta para  $F(t)$ , pues, tratándose de un sistema dinámico, sería necesario medir con infinita precisión las condiciones iniciales de todo el sistema, lo cual no es posible y por tanto  $F(t)$  no puede ser determinada ni existir en el régimen determinista. Afortunadamente, las observaciones experimentales hacen evidente que dicha fuerza es dominada por fricción debido al medio  $-\gamma v(t)$ , la cual es proporcional a la velocidad de la partícula coloidal. El coeficiente de fricción –suponiendo una partícula esférica –está dado explícitamente por la Ley de Stokes:

$$\gamma = 6\pi\eta a. \quad (1.3)$$

Aquí,  $a$  es el radio de la partícula y  $\eta$  es la viscosidad dinámica del medio. Asimismo esperamos una fuerza estocástica  $\xi(t)$  debida a fluctuaciones locales en la densidad del fluido, concretamente, a las colisiones entre los constituyentes del fluido y la partícula suspendida, provenientes de estas fluctuaciones. Las ecuaciones de movimiento para la posición  $x(t)$  y velocidad  $v(t)$  (también conocida como ecuación de Langevin) de una partícula en movimiento Browniano bajo un potencial externo  $U(x)$ , son:

$$\begin{aligned} \frac{dx(t)}{dt} &= v(t) \\ \frac{dv(t)}{dt} &= -\frac{\gamma}{m}v(t) + \frac{1}{m}\xi(t) - \frac{1}{m}U'(x). \end{aligned} \quad (1.4)$$

## 1. INTRODUCCIÓN.

### MATERIA ACTIVA Y MOVIMIENTO BROWNIANO

---

En los siguientes párrafos describiremos las propiedades que debe satisfacer  $\xi(t)$ , basado en las observaciones macroscópicas del movimiento Browniano, por simplicidad tomaremos  $U(x) = 0$ . Antes, pensemos por un momento que los efectos de empuje debido a las colisiones,  $\xi(t)$  pueden ser ignorados respecto a los efectos de arrastre,  $-\gamma/mv$ . Bajo esta hipótesis, la segunda ecuación de 1.4 se reduce a:

$$\frac{dv(t)}{dt} = -\frac{\gamma}{m}v(t), \quad (1.5)$$

cuya solución es una exponencial decreciente:

$$v(t) = e^{-t/\tau_B}v_0, \quad \tau_B = \frac{m}{\gamma}. \quad (1.6)$$

De esta ecuación obtenemos de manera natural la escala de tiempo  $\tau_B$ . De acuerdo con este resultado, la velocidad de una partícula en suspensión siempre decaerá a cero para tiempos largos comparados  $\tau_B$ . Supongamos que se tienen muchas partículas diluidas en el medio, a este conjunto de partículas les denominamos ensamble. En equilibrio térmico, las partículas deben satisfacer el principio de equipartición de la energía, es decir, cada grado de libertad cuadrático aporta  $k_B T/2$  a la energía interna del sistema. Teniendo únicamente energía cinética en una dimensión, cada partícula aporta en promedio:

$$\langle v^2(t) \rangle = \frac{k_B T}{m}. \quad (1.7)$$

El promedio  $\langle \rangle$  empleado, es tomado de las velocidades de todas las partículas en el medio a tiempo  $t$ . Es decir, si se tienen  $N$  partículas coloidales,  $\langle v^2(t) \rangle \equiv N^{-1} \sum_i^N v_i^2(t)$ . Este promedio se denomina “de ensamble”, al ser tomado sobre el número de partículas y no sobre las variables espaciales o temporales. Formalmente se denomina ensamble a un conjunto de sistemas cuyas configuraciones microscópicas (las cuales pueden ser muy distintas de sistema en sistema) se asocian a las mismas observables macroscópicas. Estas variables son en general la energía del sistema, el número de partículas, el volumen y la temperatura. En este sentido, las partículas del ensamble que consideramos provienen de distintas “realizaciones”, es decir, a distintas observaciones de las partículas coloidales bajo las mismas condiciones iniciales y del medio.

Retomando la ecuación 1.6, notamos que ésta siempre decae a cero en el tiempo para todas las partículas:

$$\langle v^2(t) \rangle = e^{-2t/\tau_B} \langle v_0^2 \rangle \longrightarrow 0. \quad (1.8)$$

Aún más, en equilibrio térmico con el medio, la temperatura del ensamble es la

misma que la temperatura de sus alrededores, donde  $T > 0$ . Por lo tanto la fuerza ejercida por las colisiones estocásticas es necesaria para obtener la correcta equipartición de la energía. En dicha fuerza se ignoran procesos dinámicos detallados (grados de libertad del medio), pero se resumen sus efectos en sus momentos estadísticos.

Dado que en la ecuación de Langevin ya se ha tomado en cuenta el efecto de arrastre por permanecer en el medio ( $-\gamma v$ ), el promedio sobre las partículas de las fuerzas fluctuantes debe ser nulo, es decir,  $\xi(t)$  no contribuye a una dirección preferencial cuando se toman en cuenta a todas las partículas:

$$\langle \xi(t) \rangle = 0. \quad (1.9)$$

Es decir, el promedio de ensamble debe ser nulo a todo tiempo. Esto corresponde al primero momento de  $\xi(t)$  de interés. Pensemos ahora que ocurre en un intervalo de tiempo  $\Delta t$  pequeño comparado con  $\tau_B$ . Como mencionamos antes, en este tiempo ocurren  $10^7$  colisiones, lo que implica que entre dos tiempos  $t$  y  $t'$ , tal que  $\Delta t = t - t'$ , los impactos ocurridos no tienen correlación o memoria alguna, salvo que ocurran al mismo tiempo. Esto podemos traducirlo a la autocorrelación de  $\xi$  a distintos tiempos,

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle \propto \delta(t - t'). \quad (1.10)$$

Si tomamos  $t \neq t'$ , la variable  $\xi(t)\xi(t')$  debe tener media nula pues sus valores han cambiado aleatoriamente para cada partícula, sin guardar correlación alguna.

Para hallar la constante de proporcionalidad y la  $\delta$  que aparece cuando  $t = t'$ , volvemos a la ecuación de Langevin 1.4. La solución analítica para la velocidad está dada por:

$$v(t) = e^{-t/\tau_B} v_0 + \frac{1}{m} \int_0^t e^{-(t-s)/\tau_B} \xi(s) ds. \quad (1.11)$$

Es necesario definir qué representa la integral de una variable estocástica  $\xi$ , de manera que la solución se encuentre bien definida (válida a todo tiempo). Para emplear las reglas del cálculo usual (no estocástico) es necesario imponer una condición sobre la variable  $\xi(t)$ . Pese a que una variable aleatoria suele no ser diferenciable, ésta puede ser integrable. Esto es, que se satisfaga  $\xi(t) = dW(t)/dt$ , donde  $W(t)$  es igualmente una variable aleatoria y físicamente representa las fluctuaciones en las colisiones que actúan sobre una partícula suspendida en un medio acuoso. Dado que esto soluciona el problema en la integral de la ecuación 1.11, nos interesa darle sentido al papel de  $W(t)$ . Para ello reescribimos la ecuación 1.4 en forma diferencial:

$$dv(t) = -\frac{\gamma}{m} v(t) dt + \frac{1}{m} dW(t), \quad (1.12)$$

## 1. INTRODUCCIÓN.

### MATERIA ACTIVA Y MOVIMIENTO BROWNIANO

---

donde  $dW(t) = \xi(t)dt$ . Integrando los diferenciales obtenemos:

$$\begin{aligned} v(t) - v(0) &= -\frac{\gamma}{m} \int_0^t v(s)ds + \int_0^t dW(s) \\ &= -\frac{\gamma}{m} [x(t) - x(0)] + \frac{1}{m} [W(t) - W(0)]. \end{aligned} \quad (1.13)$$

Hemos podido integrar la velocidad pero el problema de conocer la distribución de  $\xi$  no se ha resuelto al introducir  $W$ ; sin embargo, esta nueva situación es más tratable.

Dividiendo  $t$  en  $n$  subintervalos ordenados ( $0 = t_0 < t_1, \dots < t_n = t$ ) podemos expresar  $W(t) - W(0)$  como la siguiente suma telescópica,

$$W(t) - W(0) = \sum_{k=1}^n [W(t_k) - W(t_{k-1})]. \quad (1.14)$$

Dado que la partícula experimenta del orden de  $10^7$  colisiones por segundo con las partículas del medio, los intervalos  $\Delta_i t = t_i - t_{i-1}$  serán siempre macroscópicos comparados con el tiempo promedio entre colisiones. Estos numerosos impactos anulan todo tipo de correlación entre lo que ocurre en el intervalo  $(t_i - t_{i-1})$  y lo que ha ocurrido antes de  $t_{i-1}$ .

Como se mencionó antes, el promedio de la fuerza  $\xi(t)$  debe promediar cero en el ensamble. Si elegimos  $W(0) = 0$  entonces debe cumplirse  $\langle W(t_k) \rangle = 0$ , pues en equilibrio, el promedio de ensamble es independiente del tiempo. Por otro lado, sobre las colisiones, sabemos que los incrementos (o decrementos)  $W(t_k) - W(t_{k-1})$  son independientes. Para tiempos largos suponemos que el movimiento aleatorio del medio alcanza un estado estacionario. Entonces los incrementos son también estacionarios e idénticamente distribuidos con media cero. Aplicando el teorema de límite central<sup>1</sup> a la ecuación 1.14 podemos concluir que  $W(t)$  se distribuye normalmente (distribución Gaussiana) con media igual a cero. A una variable que satisface: 1)  $W(0) = 0$ , 2) ser continua en todo punto y 3) tener incrementos independientes  $W(t_k) - W(t_{k-1})$ , distribuidos Gaussianamente con media cero y varianza igual a  $t_k - t_{k-1}$ , se le conoce como proceso de Wiener (21).

Ahora que hemos caracterizado a  $W$  en términos de su distribución, queda claro que no es la integral de la trayectoria  $x(t)$  la que es relevante en la teoría del movimiento Browniano, sino la estadística de sus trayectorias y velocidades

---

<sup>1</sup>La suma de  $N$  variables aleatorias independientes de media  $\mu_i$  y varianza  $\sigma_i^2$  se aproxima a una variable distribuida Gaussianamente con media  $\sum \mu_i$  y varianza  $\sum \sigma_i^2$  a medida que  $N \rightarrow \infty$ .

y funciones que dependan de éstas. En este sentido, una cantidad de interés es el desplazamiento cuadrático medio (DCM), el cual nos ayuda a establecer la diferencia entre lo que denominamos regímenes balísticos y difusivos, como veremos a continuación. Una vez establecido el régimen difusivo, procederemos a hallar la constante de proporcionalidad en la relación 1.10, con lo que se finaliza la caracterización de la ecuación de Langevin.

Para un ensamble de  $N$  partículas con posiciones dadas por  $x_i(t)$  el DCM se define como:

$$\text{DCM} = \langle [x(t) - x(0)]^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_i^N [x_i(t) - x_i(0)]^2. \quad (1.15)$$

Si todas las partículas inician en el mismo punto, i.e.  $x_i(0) = 0$ , entonces el desplazamiento cuadrático medio está expresado por  $\langle x^2(t) \rangle$ , la varianza de las trayectorias al tiempo  $t$ . Este valor puede representar el promedio de ensamble o el promedio sobre realizaciones (observar una única partícula reiteradas ocasiones bajo una misma condición inicial).

Ahora que sabemos que  $\xi(t)$  se encuentra bien definido en la ecuación de Langevin, podemos usar la ecuación 1.4 y 1.9 para conocer el DCM de una en el movimiento Browniano. Multiplicando 1.4 por la trayectoria  $x(t)$  obtenemos por un lado:

$$x(t) \frac{dv(t)}{dt} = \frac{1}{2} \frac{d^2 x^2(t)}{dt^2} - v^2(t),$$

y del lado derecho:

$$-\frac{1}{\tau_B} x(t)v(t) + \frac{1}{m} x(t)\xi(t) = -\frac{1}{2\tau_B} \frac{dx^2(t)}{dt} + \frac{1}{m} x(t)\xi(t).$$

De manera que al tomar el promedio sobre un ensamble de partícula y usando la expresión 1.9 obtenemos:

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle x^2(t) \rangle + \frac{1}{\tau_B} \frac{d}{dt} \langle x^2(t) \rangle = 2 \langle v^2(t) \rangle. \quad (1.16)$$

Hemos empleado que  $x$  y  $\xi$ , son variables independientes en el ensamble (para cada partícula, aunque  $x$  está correlacionada con  $\xi$  en el tiempo), por lo que el promedio del producto, es el producto de los promedios, y dada la ecuación 1.9, el producto  $\langle x \rangle \langle \xi \rangle$ , es nulo. Por otra parte, el principio de equipartición nos permite identificar a la velocidad cuadrática media como una constante de movimiento, pues ésta satisface:  $m \langle v^2(t) \rangle / 2 = k_B T / 2$ . Bajo las condiciones iniciales  $\langle x_0^2 \rangle = 0$  y  $d \langle x^2(t) \rangle / dt|_{t=0} = 0$ , la solución para el DCM está dada por:

## 1. INTRODUCCIÓN.

### MATERIA ACTIVA Y MOVIMIENTO BROWNIANO

---

$$\langle x^2(t) \rangle = \frac{2k_B T \tau_B^2}{m} \left[ \frac{t}{\tau_B} - (1 - e^{-t/\tau_B}) \right]. \quad (1.17)$$

Para el caso en que  $t \ll \tau_B$  (régimen balístico) se tiene un comportamiento consistente con las ecuaciones de partícula libre:

$$\langle x^2(t) \rangle = \langle v^2 \rangle t^2, \quad (1.18)$$

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

$$\langle x^2(t) \rangle = \frac{2k_B T}{\gamma} t. \quad (1.19)$$

De la ecuación anterior, es de interés el término  $k_B T / \gamma$ , conocido como coeficiente de difusión,  $D$  y que es la relación entre el DCM y el tiempo:

$$D = \frac{k_B T}{\gamma}. \quad (1.20)$$

En general, es posible definir al coeficiente de difusión como:

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2d} \frac{1}{t} \langle x^2(t) \rangle, \quad (1.21)$$

donde  $d$  es el número de dimensiones en las que es posible la difusión; hasta ahora y en lo posterior,  $d = 1$ . Esta definición permite extender su uso en condiciones donde hay potenciales externos o en regímenes no inerciales (caso sobreamortiguado).

La divergencia del desplazamiento cuadrático medio de un ensamble Browniano es un indicador de ausencia de equilibrio mecánico, y por ende, ausencia de equilibrio uniforme. Al inicio de esta sección se mencionó que el movimiento Browniano representa a un sistema fuera de equilibrio; ahora precisamos que nos referimos a equilibrio termodinámico uniforme, pues en principio, el equilibrio térmico con el medio sí se alcanza. En lo subsecuente veremos que el equilibrio termodinámico uniforme es compatible con un ensamble Browniano cuando existen constricciones energéticas (potenciales externos) que restringen el desplazamiento cuadrático medio del sistema.

Por otra parte, hasta ahora hemos empleado que es válido el principio de equipartición; sin embargo, aún es necesario ligar el promedio de la velocidad al cuadrado con la autocorrelación de la fuerza estocástica,  $\xi(t)$ . Una vez marcados los dos regímenes (balístico y difusivo), retomamos la ecuación 1.11, y calculamos el promedio de ensamble de su cuadrado:

$$\begin{aligned} \langle v^2(t) \rangle &= \langle v_0^2 \rangle e^{-2\frac{t}{\tau_B}} + \frac{2}{m} \langle v_0 \rangle \int_0^t \langle \xi(s) \rangle e^{-\frac{1}{\tau_B}(t-s)} ds + \\ &+ \frac{1}{m^2} \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_B}(2\tau - s_1 - s_2)} \langle \xi(s_1) \xi(s_2) \rangle ds_1 ds_2. \end{aligned} \quad (1.22)$$

En el régimen difusivo podemos ignorar el primer término. Por otra parte, por la ecuación 1.9, desechamos el segundo y, finalmente con la ecuación 1.10 podemos eliminar una integral en el tercer término, pues  $\langle \xi(s_1) \xi(s_2) \rangle = c \delta(s_1 - s_2)$ :

$$\begin{aligned} m \langle v^2(t) \rangle &= \frac{1}{m} \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_B}(2\tau - s_1 - s_2)} c \delta(s_1 - s_2) ds_1 ds_2 \\ &= \frac{c}{m} \int_0^t e^{-\frac{2}{\tau_B}(t-s_2)} ds_2 \\ &= \frac{c}{m} \frac{\tau_B}{2} \left[ 1 - e^{-2\frac{t}{\tau_B}} \right] = k_B T. \end{aligned} \quad (1.23)$$

Nuevamente,  $k_B T$  es la contribución que se tiene por  $m \langle v^2(t) \rangle$  en una dimensión por el principio de equipartición. Notemos que el término exponencial decreciente es del mismo orden del que fue ignorado anteriormente por encontrarnos en el régimen difusivo, por tanto tenemos que el valor de la constante  $c$  es:

$$c = 2\gamma k_B T. \quad (1.24)$$

En lo subsecuente emplearemos el renombramiento  $\xi^*(t) = \sqrt{2\gamma k_B T} \xi(t)$ , donde  $\xi^*(t)$  representa a la variable que empleamos en 1.4.

### 1.1.2. Movimiento Browniano en el régimen sobreamortiguado

De particular interés es el régimen sobreamortiguado con un potencial externo, pues las partículas *run and tumble* que estudiaremos se encuentran en este régimen. Ignorar los efectos inerciales se justifica en el hecho de que las partículas microscópicas típicamente en un régimen de números de Reynolds bajos (22) sienten una fuerza de fricción mucho mayor que la aceleración debido a fuerzas externas. Es precisamente la ecuación de Langevin la que en este caso establece la conexión directa entre el modelo *run and tumble* y el concepto de equilibrio

## 1. INTRODUCCIÓN.

### MATERIA ACTIVA Y MOVIMIENTO BROWNIANO

---

local a través movimiento Browniano sujeto a una temperatura efectiva.

Con lo descrito en la sección anterior, reescribimos la ecuación 1.4 introduciendo un potencial externo  $U(x)$  que depende solo de la coordenada espacial,  $x$ . La ecuación de Langevin en el régimen sobreamortiguado es:

$$\frac{dv(t)}{dt} = -\frac{\gamma}{m}v(t) + \frac{1}{m}\sqrt{2\gamma k_B T}\xi(t) - \frac{1}{m}U'(x) = 0. \quad (1.25)$$

Hecho esto, hemos bajado el grado de la ecuación diferencial, dejándonos únicamente con la derivada de la trayectoria:

$$\frac{dx(t)}{dt} = -\mu U'(x) + \sqrt{2\mu k_B T}\xi(t), \quad (1.26)$$

donde definimos el inverso del coeficiente de fricción  $\mu = \gamma^{-1}$  como la movilidad de la partícula.

Pensando nuevamente en la estadística que puede derivarse de las posiciones  $x(t)$ , ahora que se tiene explícitamente la energía potencial  $U(x)$  asociada a cada posición, es deseable recobrar la estadística de Boltzmann, donde la probabilidad de encontrarse en la posición  $x$  es decreciente exponencialmente con el valor de la energía  $P(x) \propto \exp[-U(x)/k_B T]$ .

Para ello, echamos mano de la versatilidad para calcular promedios. Típicamente, el promedio de una función de la posición,  $f(x)$ , lo escribimos como:

$$\langle f(x(t)) \rangle = \frac{1}{N} \sum_i^N f(x_i(t)),$$

donde  $i$  indexa a las partículas. Cuando se tiene  $N \rightarrow \infty$ , es natural elegir una manera distinta de sumar los términos  $f(x_i)$ , separándolos en grupos, donde en cada grupo, cada partícula esté más cerca de un centro  $x^k$  ( $k$  es el índice del grupo). En la suma denotaremos a estas partículas como  $x_i \in X^k$ , donde  $X^k$  es subconjunto del ensamble original. Supongamos que se tienen  $M^k$  elementos por grupo y un total de  $m$  de ellos, entonces podemos reescribir el promedio de  $f$  como:

$$\langle f(x(t)) \rangle = \frac{1}{N} \left( \sum_{x_i \in X^1}^{M^1} f(x_i) + \dots + \sum_{x_i \in X^m}^{M^m} f(x_i) \right).$$

Esta nueva forma de escribir el promedio tiene exactamente la misma información que la definición de promedio de ensamble para  $f$ ; sin embargo, en el límite donde  $N$  es muy grande y permite tener subconjuntos  $X^k$  donde todas las partículas se encuentran arbitrariamente cercanas, es posible aproximar el valor de la suma de

cada grupo, por el valor de la función en el centro  $x_k$  por el número de partículas en dicho grupo:  $f(x_k)M^k$ ,

$$\langle f(x(t)) \rangle \approx \sum_{\text{grupos}} f(x_k) \frac{M^k}{N}.$$

Notemos que el factor  $M^k/N$  es la fracción de partículas cercanas a  $x^k$ , lo cual interpretamos como la probabilidad (frecuentista) de hallar la partícula en  $x^k$  a un tiempo dado. Etiquetando con  $P$  a esta probabilidad, nos interesa conocer el cambio de  $P^k$  a través de los grupos formados, es decir, a través del dominio espacial. Si identificamos un cambio espacial en la probabilidad en el dominio donde se encuentran las partículas, como un cambio de concentración de partículas, sabemos que ésta generará un flujo de partículas proporcional a dicho gradiente. Comúnmente esto es conocido como la Primera Ley de Fick (23):

$$J = \langle v \rangle P + D \frac{\partial P}{\partial x}, \quad (1.27)$$

donde se ha incluido la velocidad de deriva,  $\langle v \rangle$ , lo cual hace que en el sentido estricto, se trate de un proceso de difusión-deriva (*drift-diffusion*). La conexión con la dinámica de Langevin, reside en hallar los valores de  $\langle v \rangle$  y de la constante de difusión  $D$ . De la ecuación 1.26, sabiendo que el valor promedio de la variable estocástica es nulo  $\langle \xi(t) \rangle = 0$ , obtenemos que la velocidad de deriva está dada enteramente por el potencial externo  $\langle \dot{x}(t) \rangle = -\mu \langle U'(x) \rangle$ . A su vez, el valor de la difusión (en ausencia del potencial) es  $D = \mu k_B T$  (deducido en 1.20), obtenido al integrar la ecuación diferencial para el desplazamiento cuadrático medio. En un estado estacionario (independiente del tiempo) dicho flujo es nulo, dando como resultado una distribución de probabilidad que solo depende del espacio. Dado que al trabajar con partículas activas nos enfocaremos únicamente en el régimen estacionario, nos limitamos a describir únicamente este caso para partículas pasivas. Sustituyendo en la ecuación 1.27  $J = 0$  (régimen estacionario) y el valor de la velocidad de deriva, la probabilidad satisface:

$$\frac{dP}{dx} = -D^{-1} \mu U'(x) P, \quad (1.28)$$

cuya solución corresponde a una exponencial decreciente:

$$P(x) \propto \exp[-\mu U(x) D^{-1}] = \exp[U(x)(k_B T)^{-1}]. \quad (1.29)$$

Esta última igualdad nos dice que la probabilidad de ocupación de  $x$  es proporcional al factor de Boltzmann, haciendo una conexión con la probabilidad relativa

## 1. INTRODUCCIÓN.

### MATERIA ACTIVA Y MOVIMIENTO BROWNIANO

---

de un estado en un sistema con múltiples estados en equilibrio termodinámico a temperatura  $T$ .

Para finalizar, al establecer una ecuación diferencial para  $P$ , pasamos de un régimen discreto a un régimen continuo. Afortunadamente, la transición es directa, pues cuando  $N \rightarrow \infty$ , y en el límite estacionario, podemos tener centros  $x_k$  arbitrariamente cercanos entre sí, de manera que:

$$\langle f(x) \rangle \approx \sum_{\text{grupos}} f(x_k) P^k \rightarrow \int f(x) P(x) dx. \quad (1.30)$$

Cabe mencionar, que a pesar de haber hecho una derivación de 1.30 *ad hoc* al problema, se trata de una definición estándar en cualquier problema de física estadística. Desde el punto de vista teórico, es conveniente calcular promedios empleando distribuciones de probabilidad,  $P$ ; no obstante, al realizar simulaciones numéricas, son más socorridas las definiciones que involucran directamente a las partículas individuales.

## 1.2. Run & Tumble

Estamos interesados en describir sistemas activos, cuyo nado y colisiones con el medio dependen continuamente en la posición y dirección de su movimiento. Este problema yace en el ámbito de la física estadística pero fue originalmente planteado para entender caminatas aleatorias de la bacteria *Escherichia coli* (24) durante quimiotaxis.

Históricamente, Taylor (25) estudió la difusión de calor a través de un fluido debido a movimiento turbulento, pero continuo, del mismo; la cual resultó ser análoga a la difusión molecular debido a las vibraciones de los componentes del fluido. Posteriormente, Goldstein (26) desarrolló la correspondiente teoría para difusión mediante movimientos discontinuos, tomando un ensamble de partículas que se mueven independientemente unas de las otras. En dicho artículo se obtiene la ecuación del telégrafo<sup>1</sup> para describir los cambios en el tiempo y espacio de la densidad de probabilidad de un ensamble de partículas que siguen un proceso de difusión unidimensional (solo dos direcciones posibles), también conocida como difusión dicotómica.

Nos interesa conocer la difusión dicotómica en el caso activo, particularmente en la dinámica *Run and Tumble*. Este modelo considera partículas que se mue-

---

<sup>1</sup>Ecuaciones diferenciales lineales acopladas que describen el voltaje y corriente en una línea de transmisión como función del tiempo y la distancia.

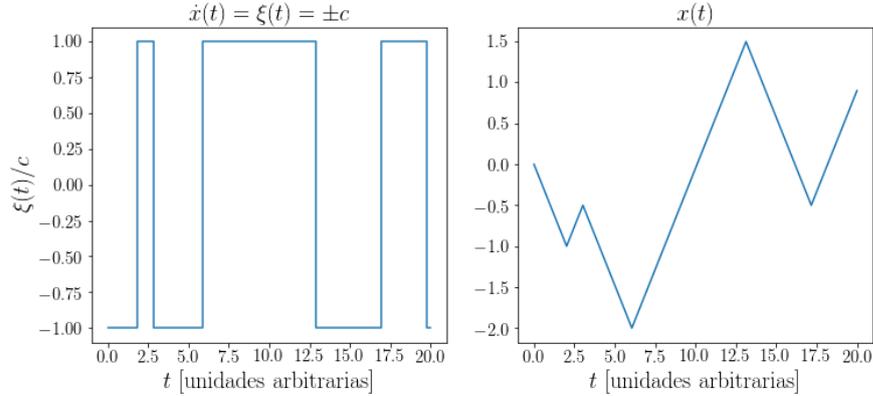


Figura 1.4: Esquema de la velocidad (panel izquierdo) en un proceso dicotómico y la trayectoria continua (panel derecho) que produce. Como puede observarse, la velocidad toma solo dos valores  $\xi(t)/c = \pm 1$  ( $c$  es la velocidad de la partícula) y es discontinua; sin embargo la trayectoria  $x(t)$  asociada si presenta continuidad.

ven en cierta dirección a lo largo de una longitud de persistencia (*run*) antes de cambiar abruptamente de dirección (*tumble*) debido a colisiones con el medio, quimiotaxis o por presencia de depredadores, entre otros motivos. En este trabajo, el movimiento del agente externo está caracterizado por una restricción energética debido a la presencia de un potencial externo.

Para estudiar la difusión es necesario responder cuál es la probabilidad de hallar una partícula en un intervalo arbitrario del dominio,  $\Delta x$ , esto es, determinar la distribución que sigue  $x$  ( $x \sim P(x)$ <sup>1</sup>), si suponemos que la velocidad de la partícula puede tomar dos direcciones,  $\dot{x}(t) = \pm v$ . Cuando las partículas no tienen interacciones entre sí y no existe un potencial externo esta velocidad de nado es constante; sin embargo, para poder establecer una relación directa entre la estadística del *run and tumble* con potenciales externos, es necesario permitir que la velocidad de nado dependa de la posición,  $v = v(x)$ . En la figura 1.4 mostramos gráficas representativas de los valores que toma la velocidad y la posición en función del tiempo en un proceso dicotómico.

A continuación, haremos la derivación de las ecuaciones diferenciales que satisface la distribución de probabilidad  $P(x)$ , en el caso donde  $v$  y la tasa de cambios de dirección,  $\alpha$ , no dependen del potencial externo. Para ello pensemos en una malla discreta cuyos sitios están separados por una distancia  $a$  y etiquetados por números enteros  $j$ . Cada sitio representa una posición que puede ocupar una partícula en difusión dicotómica. Nos preguntamos cuál es la probabilidad de estar en  $x = ja$  al tiempo  $t = n\tau$ , ( $P(x, t)$ ). Supongamos que al tiempo  $t = 0$ ,

<sup>1</sup>Esto se lee:  $x$  sigue la función de distribución  $P$

## 1. INTRODUCCIÓN.

### MATERIA ACTIVA Y MOVIMIENTO BROWNIANO

---

todas las partículas inician en  $x = 0$ , y comienzan a moverse en partes iguales a la derecha y a la izquierda. Si a cada tiempo  $t$  separamos el ensamble de partículas como aquellas que se mueven hacia la derecha de las que se mueven a la izquierda con probabilidades  $P_R(x, t)$  y  $P_L(x, t)$  respectivas, entonces la probabilidad de hallarse en  $x$  al tiempo  $t$  se descompone en:  $P(x, t) = P_R(x, t) + P_L(x, t)$ .

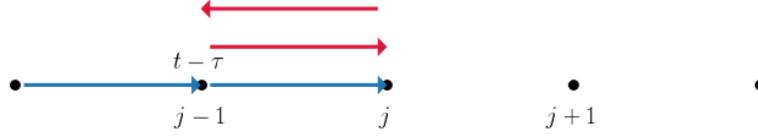


Figura 1.5: Sitios en una malla discreta en los cuales puede moverse una partícula activa. En azul se muestra la trayectoria de la partícula moviéndose a la derecha y que en el tiempo  $t - \tau$  ha continuado en su misma dirección. En rojo, la partícula proveniente de la izquierda ha cambiado su dirección en el mismo tiempo. Ambas partículas llegan al punto  $j$  y representan la contribución a  $P_R$ . La contribución de  $P_L$  se bosqueja de manera similar.

Supongamos también, que la probabilidad de moverse hacia la derecha (izquierda) y continuar en la misma dirección que en el paso anterior es  $\lambda_R$  ( $\lambda_L$ ) y la probabilidad de cambiar de dirección es  $\nu_R = 1 - \lambda_R$ , ( $\nu_L = 1 - \lambda_L$ ). La probabilidad de estar en  $x$  al tiempo  $t$  proviniendo de la derecha depende únicamente en la probabilidad de estar en el paso anterior en  $x - a$ . A dicha probabilidad contribuyen el producto de provenir de la derecha y continuar en la misma dirección  $\lambda_R P(x - a, t - \tau)$  (flechas azules en la figura 1.5) más al producto de provenir de la izquierda pero haber cambiado de dirección  $\nu_L P_L(x - a, t - \tau)$  (flechas rojas). De la misma manera, la probabilidad de hallarse en  $x$  al tiempo  $t$  proviniendo de la izquierda depende únicamente de haber estado en  $x + a$ , con sus respectivas contribuciones. Esto conlleva a las siguientes ecuaciones discretas pero acopladas para  $P_R$  y  $P_L$

$$\begin{aligned} P_R(x, t) &= \lambda_R P_R(x - a, t - \tau) + \nu_L P_L(x - a, t - \tau), \\ P_L(x, t) &= \lambda_L P_L(x + a, t - \tau) + \nu_R P_R(x + a, t - \tau). \end{aligned} \quad (1.31)$$

Al tomar el límite cuando los espacios entre la malla son infinitesimales y por tanto, la trayectoria, continua se obtiene una ecuación de tipo difusiva. Los límites  $a \rightarrow 0$ ,  $2\tau \rightarrow 0$  deben satisfacer simultáneamente:

$$\lim_{\substack{a \rightarrow 0 \\ \tau \rightarrow 0}} \frac{a}{2\tau} = v, \text{ velocidad de nado,} \quad (1.32)$$

y la tasa de cambio de dirección:

$$\lim_{\substack{\nu_i \rightarrow 0 \\ \tau \rightarrow 0}} \frac{2\nu_i}{\tau} = \alpha_i, \quad i = L, R \quad (26). \quad (1.33)$$

Para  $P_R$ , la probabilidad de estar en  $x$  al tiempo  $t$  tenemos la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned} P_R(x, t) &= \lambda_R P_R(x - a, t - \tau) + \nu_L P_L(x - a, t - \tau) \\ &= P_R(x - a, t - \tau) + \nu_L P_L(x - a, t - \tau) - (1 - \lambda_R) P_R(x - a, t - \tau) \\ &= P_R(x - a, t - \tau) + \nu_L P_L(x - a, t - \tau) - \nu_R P_R(x - a, t - \tau). \end{aligned}$$

Sustrayendo el primer término del lado derecho al lado izquierdo obtenemos :

$$\begin{aligned} P_R(x, t) - P_R(x - a, t - \tau) &= \frac{1}{2} [P_R(x, t) - P_R(x - a, t - \tau)] \\ &\quad + \frac{1}{2} a \left[ \frac{P_R(x, t) - P_R(x - a, t - \tau)}{a} \right]. \end{aligned}$$

Dividiendo entre  $\tau$  y tomando el doble límite  $\tau, a \rightarrow 0$  los últimos dos términos obtenemos del lado izquierdo:

$$\begin{aligned} \lim_{\substack{\tau \rightarrow 0 \\ a \rightarrow 0}} \frac{1}{2} \frac{P_R(x, t) - P_R(x - a, t - \tau)}{\tau} + \frac{1}{2} \frac{a}{\tau} \frac{P_R(x, t) - P_R(x - a, t - \tau)}{a} &= \\ &= \frac{\partial P_R(x, t)}{\partial t} - \frac{\partial v P(x, t)}{\partial x}, \end{aligned}$$

y del lado derecho de la ecuación:

$$\lim_{\substack{\tau \rightarrow 0 \\ a \rightarrow 0}} \frac{1}{2} \left[ \frac{2\nu_L}{\tau} P_L(x - a, t - \tau) - \frac{2\nu_R}{\tau} P_R(x - a, t - \tau) \right] = \frac{1}{2} [\alpha_L P_L(x, t) - \alpha_R P_R(x, t)].$$

Por lo que la ecuación diferencial a resolver para  $P_R(x, t)$  es:

## 1. INTRODUCCIÓN.

### MATERIA ACTIVA Y MOVIMIENTO BROWNIANO

---

$$\frac{\partial P_R(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial v P_R(x, t)}{\partial x} = \frac{1}{2} [\alpha_L P_L(x, t) - \alpha_R P_R(x, t)]. \quad (1.34)$$

De manera enteramente análoga, obtenemos para  $P_L(x, t)$ :

$$\frac{\partial P_L(x, t)}{\partial t} - \frac{\partial v P_L(x, t)}{\partial x} = \frac{1}{2} [\alpha_R P_R(x, t) - \alpha_L P_L(x, t)]. \quad (1.35)$$

El signo en la derivada parcial  $\partial_x P(x, t)$  proviene de tomar la diferencia  $P(x, t) - P(x + a, t - \tau)$  en el límite. En el caso donde las velocidades y las tasas de cambio de dirección dependen del espacio ( $v_i = v_i(x)$  y  $\alpha_i = \alpha_i(x)$ ,  $i = R, L$ ), es posible generalizar las ecuaciones 1.34, 1.35:

$$\frac{\partial}{\partial t} P_R(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} v_R(x) P_R(x, t) = \frac{1}{2} [\alpha_L(x) P_L(x, t) - \alpha_R(x) P_R(x, t)] \quad (1.36)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} P_L(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} v_L(x) P_L(x, t) = \frac{1}{2} [\alpha_R(x) P_R(x, t) - \alpha_L(x) P_L(x, t)]. \quad (1.37)$$

Las ecuaciones 1.36 y 1.37 pueden escribirse a su vez en términos de la probabilidad total  $P(x, t) = P_R(x, t) + P_L(x, t)$ , también conocida como probabilidad de grano grueso (*coarse-grained probability*) y el flujo de probabilidad  $J(x, t) = v_R P_R(x, t) - v_L P_L(x, t)$ . Es claro que este cambio de variables no reduce el orden ni el acoplamiento de las ecuaciones diferenciales, por lo que aún es necesario resolver dos ecuaciones diferenciales acopladas. La primera de las ecuaciones en términos de  $P$  y  $J$ , proviene de sumar las ecuaciones 1.34 y 1.35

$$\frac{\partial}{\partial t} (P_R + P_L) + \frac{\partial}{\partial x} (v_R P_R - v_L P_L) = \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0, \quad (1.38)$$

la cual identificamos como la ecuación de continuidad, donde el cambio temporal en la probabilidad está dado por el flujo espacial de la misma. La segunda ecuación la hallamos derivando temporalmente el flujo,  $\partial_t J(x, t)$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial J}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} [v_R P_R - v_L P_L] \\ &= v_R \frac{\partial P_R}{\partial t} - v_L \frac{\partial P_L}{\partial t} \\ &= -v_R \left[ \frac{\partial}{\partial x} v_R P_R + \frac{1}{2} (\alpha_R P_R - \alpha_L P_L) \right] - v_L \left[ \frac{\partial}{\partial x} v_L P_L + \frac{1}{2} (\alpha_R P_R - \alpha_L P_L) \right] \\ &= - \left\{ v_R^2 \frac{\partial P_R}{\partial x} + v_L^2 \frac{\partial P_L}{\partial x} + v_R v_R' P_R + v_L v_L' P_L + \frac{1}{2} (v_R + v_L) (\alpha_R P_R - \alpha_L P_L) \right\}. \end{aligned}$$

A partir de las definiciones de  $P(x, t)$  y  $J(x, t)$ , es posible escribir  $P_R$  y  $P_L$  en términos de la probabilidad y el flujo:

$$\begin{aligned} P_R(x, t) &= \frac{v_L(x)P(x, t) + J(x, t)}{v_R(x) + v_L(x)}, \\ P_L(x, t) &= \frac{v_R(x)P(x, t) - J(x, t)}{v_R(x) + v_L(x)}. \end{aligned} \quad (1.39)$$

De éstas, obtenemos sus derivadas parciales espaciales para poder sustituirlas en la ecuación de  $\partial_t J(x, t)$ ,

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_R}{\partial x} &= \frac{1}{v_R + v_L} \left[ v'_L P + v_L \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial J}{\partial x} \right] + (v_L P + J) \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{v_R + v_L} \right), \\ \frac{\partial P_L}{\partial x} &= \frac{1}{v_R + v_L} \left[ v'_R P + v_R \frac{\partial P}{\partial x} - \frac{\partial J}{\partial x} \right] + (v_R P - J) \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{v_R + v_L} \right). \end{aligned} \quad (1.40)$$

Sustituyendo en la ecuación del flujo obtenemos la expresión:

$$\begin{aligned} \frac{\partial J}{\partial t} &= - \left\{ \frac{v_R^2}{v_R + v_L} \left( v'_L P + v_L \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial J}{\partial x} \right) + \frac{v_L^2}{v_R + v_L} \left( v'_R P + v_R \frac{\partial P}{\partial x} - \frac{\partial J}{\partial x} \right) \right\} + \\ &\quad - \left\{ v_R^2 (v_L P + J) \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{v_R + v_L} \right) + v_L^2 (v_R P - J) \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{v_R + v_L} \right) \right\} \\ &\quad - \left\{ \frac{v_R v'_R}{v_R + v_L} (v_L P + J) + \frac{v_L v'_L}{v_R + v_L} (v_R P - J) + \frac{1}{2} [\alpha_R (v_L P + J) - \alpha_L (v_R P - J)] \right\}. \end{aligned} \quad (1.41)$$

En ésta, agrupamos los términos que dependan de  $J$  o de su derivada parcial, los cuales identificamos por el color esmeralda en la ecuación reagrupada:

## 1. INTRODUCCIÓN.

### MATERIA ACTIVA Y MOVIMIENTO BROWNIANO

---

$$\begin{aligned}
\frac{\partial J}{\partial t} = & - \left\{ \left( \frac{v_R v'_L + v'_L v'_R}{v_R + v_L} \right) P + \left( \frac{v_R^2 v_L + v_R v_L^2}{v_R + v_L} \right) \frac{\partial P}{\partial x} + \left( \frac{v_R^2 - v_L^2}{v_R + v_L} \right) \frac{\partial J}{\partial x} \right\} \\
& - \left\{ [(v_R^2 - v_L^2) J + v_R v_L (v_R + v_L) P] \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{v_R + v_L} \right) \right\} \\
& - \left\{ \left( \frac{v_R v'_R v_L + v_L v'_L v_R}{v_R + v_L} \right) P + \left( \frac{v_R v'_R - v_L v'_L}{v_R + v_L} \right) J \right\} \\
& - \frac{1}{2} \{ (\alpha_R + \alpha_L) J + (\alpha_R v_L - \alpha_L v_R) P \}.
\end{aligned} \tag{1.42}$$

Los términos en color,  $\blacksquare$ , pueden ser reescritos en términos de las variables  $v_-(x) = v_R(x) - v_L(x)$ ,  $\alpha(x) = (\alpha_R(x) + \alpha_L(x))/2$  y  $\gamma(x) = (v'_R v_L - v'_L v_R)/(v_R + v_L)$ .

$$\begin{aligned}
\blacksquare = & - \left\{ \left( \frac{v_R^2 - v_L^2}{v_R + v_L} \right) \frac{\partial J}{\partial x} + \left[ \frac{(v_R^2 - v_L^2)(v'_R + v'_L)}{(v_R + v_L)^2} + \frac{v_R v'_R - v_L v'_L}{v_R + v_L} - \frac{1}{2} (\alpha_R + \alpha_L) \right] J \right\} \\
= & - \left\{ (v_R - v_L) \frac{\partial J}{\partial x} + \left[ \frac{v'_R v_L - v'_L v_R}{v_R + v_L} + \frac{1}{2} (\alpha_R + \alpha_L) \right] J \right\} \\
= & -v_- \frac{\partial J}{\partial x} - [\gamma + \alpha].
\end{aligned} \tag{1.43}$$

Reconocemos al producto  $v_-(x) \partial_x J(x, t)$  como un término de advección del flujo con campo de velocidad  $v_-(x)$  y a  $[\alpha(x) + \gamma(x)] J(x, t)$  como un término de reacción, dado por el promedio aritmético de las tasas de cambio de dirección, el cual, de ser positivo, influye en una disminución de  $J(x, t)$  debido a un proceso de dispersión de la dirección del movimiento, mientras que  $\gamma(x)$  toma en cuenta la dependencia espacial de las velocidades (27).

Reacomodando los términos en ambos lados de la ecuación identificamos en púrpura, a la parte de ecuación que llamamos dinámica del flujo, pues hace explícito el cambio temporal y espacial (advección y reacción) de ésta variable:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial J}{\partial t} + v_- \frac{\partial J}{\partial x} + [\alpha + \gamma] J = & - \left( \frac{v_R^2 v_L' + v_L^2 v_R' + v_R v_R' v_L + v_L v_L' v_R}{v_R + v_L} \right) P \\
 & - \left( \frac{v_R^2 v_L + v_R v_L^2}{v_R + v_L} \right) \frac{\partial P}{\partial x} - \frac{1}{2} (\alpha_R v_L - \alpha_L v_R) P \quad (1.44) \\
 & - (v_R^2 v_L + v_L^2 v_R) P \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{v_R + v_L} \right).
 \end{aligned}$$

Pese a que ahora la dinámica del flujo está enteramente descrita en términos de  $P(x, t)$ , conviene reagrupar las velocidades y tasas de cambio en términos de  $v$  y  $\alpha$ . Además, identificamos la difusión dependiente del espacio como:

$$D(x) = \frac{v_R(x)v_L(x)}{\alpha(x)}. \quad (1.45)$$

Notemos que  $v_R(x)$  y  $v_L(x)$  son ambas mayores o iguales a cero, pues la dirección está dada por el signo explícito en la definición del flujo. Definimos además la velocidad promedio:

$$V(x) = \frac{1}{2} [v_R(x) + v_L(x)], \quad (1.46)$$

la cual es simplemente el promedio aritmético de las velocidades. Sustituyendo dichas funciones en la dinámica del flujo, tenemos:

$$\begin{aligned}
 \blacksquare &= -P \frac{d}{dx} v_R v_L - v_R v_L \frac{\partial P}{\partial x} - \alpha \left[ \frac{\alpha_R v_L - \alpha_L v_R}{2\alpha} \right] P + \\
 & - \alpha \left[ \frac{v_R v_L}{\alpha} (v_R + v_L) \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{v_R + v_L} \right) \right] P \quad (1.47) \\
 &= -\alpha \left\{ \frac{1}{\alpha} P \frac{d}{dx} v_R v_L + D \frac{\partial P}{\partial x} + \left[ \frac{\alpha_R v_L - \alpha_L v_R}{2\alpha} + DV \frac{d}{dx} \frac{1}{V} \right] P \right\}.
 \end{aligned}$$

Los primeros dos términos parecen provenir de la misma ecuación. Expresando el segundo de ellos (anaranjado) en términos de la derivada de un producto, notamos que cancela al primer término:

$$\blacksquare = \frac{\partial}{\partial x} DP - P \frac{dD}{dx} = \frac{\partial}{\partial x} DP - v_R v_L P \frac{d}{dx} \frac{1}{\alpha} - \frac{1}{\alpha} P \frac{d}{dx} v_R v_L. \quad (1.48)$$

## 1. INTRODUCCIÓN.

### MATERIA ACTIVA Y MOVIMIENTO BROWNIANO

---

Por lo que finalmente tenemos que la dinámica del flujo depende de la probabilidad  $P$ , y de el cambio de ésta en el espacio, pero no de su cambio en el tiempo:

$$\begin{aligned}
 \blacksquare &= -\alpha \left\{ \frac{\partial}{\partial x} DP - v_R v_L P \frac{d}{dx} \frac{1}{\alpha} + \left[ \frac{\alpha_R v_L - \alpha_L v_R}{2\alpha} + DV \frac{d}{dx} \frac{1}{V} \right] P \right\} \\
 &= -\alpha \left\{ \left[ \frac{\alpha_R v_L - \alpha_L v_R}{2\alpha} + D \left( \frac{1}{\alpha} \frac{d\alpha}{dx} + V \frac{d}{dx} \frac{1}{V} \right) \right] P + \frac{\partial}{\partial x} DP \right\} \\
 &= -\alpha \left\{ \left[ \frac{\alpha_R v_L - \alpha_L v_R}{2\alpha} + D \frac{d}{dx} \ln \frac{\alpha}{V} \right] P + \frac{\partial}{\partial x} DP \right\} \\
 &= -\alpha \left[ v_d P + \frac{\partial}{\partial x} DP \right].
 \end{aligned} \tag{1.49}$$

En el último paso hemos definido a la velocidad de deriva ( $v_d$ ) como:

$$v_d(x) = \frac{\alpha_R(x)v_L(x) - \alpha_L(x)v_R(x)}{2\alpha(x)} + D(x) \frac{d}{dx} \frac{\alpha(x)}{V(x)}. \tag{1.50}$$

Ésta pesa la velocidad de nado en una dirección, por la tasa de cambio hacia la dirección contraria (primer sumando), factor que se desvanece cuando  $v_R(x)/\alpha_R(x) = v_L(x)/\alpha_L(x)$  y toma en cuenta la difusión pesada con el gradiente de la razón de los promedios de las tasas de cambio y velocidades (dentro de un logaritmo).

Finalmente, la ecuación resultante para la evolución de  $J(x, t)$  es:

$$\frac{\partial}{\partial t} J(x, t) + v_-(x) \frac{\partial}{\partial x} J(x, t) + [\alpha(x) + \gamma(x)] J = \alpha(x) \left[ v_d(x) P(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} D(x) P(x, t) \right]. \tag{1.51}$$

(27)

#### 1.2.1. Soluciones estacionarias

Es sabido que los efectos de persistencia en la dinámica *run and tumble* suelen estar relacionados con una exploración de las fronteras (ya sean rígidas o energéticas) del espacio donde se encuentran las partículas activas cuando la longitud de persistencia es comparable con las dimensiones del dominio mismo (28, 29). Esto a su vez se traduce a distribuciones de probabilidad espacial independientes del tiempo.

De la misma manera, nos interesan las situaciones físicas en las cuales existen soluciones estacionarias, es decir donde se cumple que para  $t$  suficientemente grande,  $P(x, t) \rightarrow P_{\text{est}}(x)$ . Particularmente deseamos explorar las soluciones estacionarias provenientes de la ecuación con un potencial externo presente.

En nuestro marco teórico, dichas soluciones estacionarias se obtienen cuando el flujo de probabilidad es nulo,  $J(x, t) = 0$ , lo cual nos lleva a la ecuación:

$$v_d(x)P_{\text{est}}(x) + \frac{d}{dx} (D(x)P_{\text{est}}(x)) = 0. \quad (1.52)$$

Las soluciones de 1.52 describen estados libres de flujo que pueden ser escritos considerando la no localidad<sup>1</sup> del cociente  $v_d(x)/D(x)$  como:

$$P_{\text{est}}(x) = \frac{Z}{D(x)} \exp \left[ \int^x -\frac{v_d(x')}{D(x')} dx' \right], \quad (1.53)$$

donde  $Z$  es la constante de normalización requerida para que la integral de la probabilidad sobre el dominio sea 1.

A su vez, las relaciones 1.45 y 1.50 conllevan a un mapeo entre las soluciones estacionarias del *run and tumble* y la ecuación de difusión para el movimiento Browniano en un medio inhomogéneo (27). Este mapeo será explotado para dar una interpretación precisa del confinamiento en movimiento activo como una característica del no-equilibrio a través de difusión y temperaturas efectivas.

La naturaleza intrínseca de no seguir un equilibrio de Boltzmann-Gibbs reside en que, en general, no existe un factor homogéneo que sustituya a  $D(x)$  por  $D$  y recuperar la estadística de Boltzmann-Gibbs:

$$P_{\text{B-G}}(x) = \frac{N}{D} \exp \left[ -\frac{G(x)}{D} \right], \quad (1.54)$$

donde  $v_d = G'(x)$ , con  $G(x)$  una función arbitraria de  $x$ , tal que sea la antiderivada de  $v_d$ .

Regresando a la interpretación de no equilibrio, la solución estacionaria 1.53 puede ser interpretada formalmente como la distribución de posiciones que sigue un ensamble de partículas con movimiento Browniano en el régimen sobreamortiguado, que se difunden con movilidad  $\mu$  en un medio con temperatura  $T(x)$  (suponiendo válida la relación de Einstein de proporcionalidad entre difusión y temperatura) y bajo la influencia de un potencial externo,  $U(x)$  si se identifica:

---

<sup>1</sup>Dependencia espacial

# 1. INTRODUCCIÓN.

## MATERIA ACTIVA Y MOVIMIENTO BROWNIANO

---

$$T(x) = D(x)/\mu k_B, \quad (1.55)$$

$$U'(x) = v_d(x)/\mu. \quad (1.56)$$

Teniendo como resultado una ecuación de Langevin sobreamortiguada con temperatura efectiva,  $T = T(x)$ :

$$\frac{dx(t)}{dt} = -\mu U'(x) + \sqrt{2\mu k_B T(x)} \xi(t). \quad (1.57)$$

En el contexto de estados estacionarios dentro de la física de no equilibrio, temperaturas inhomogéneas imposibilitan el caracterizar un sistema de manera local, tal como ocurre con el factor de Boltzmann, o factor de Boltzmann-Gibbs en sistemas en equilibrio termodinámico con respecto al intercambio de energía, donde la probabilidad está determinada únicamente por la dependencia espacial de la energía.

El efecto de no localidad debido a temperaturas no homogéneas es conocido como efecto Landauer (30). En su artículo, Landauer propone una partícula atrapada en un potencial como el que se muestra en la figura 1.6, en el cual se modifica el entorno de la partícula en la región BD a través de un calentamiento local, de tal manera que el comportamiento del sistema debido al potencial cerca de los puntos A y C, permanezca inalterado. Sin embargo, debido a las mayores fluctuaciones térmicas la estabilidad del punto A se ha convertido en metaestabilidad y la metaestabilidad de C, en estabilidad, después del calentamiento. De esta manera es posible modificar la probabilidad relativa  $P(A)/P(C)$  sin cambiar la entropía de los mismos puntos, concluyendo que no es posible dar una caracterización de la probabilidad en términos de variables locales haciendo necesaria una descripción de la cinemática en todo el dominio. En nuestro caso, esto corresponde a, por un lado, la integración de la trayectoria de un ensamble de partículas con movimiento Browniano incluyendo en la ecuación de Langevin la dependencia explícita de la temperatura con el dominio, y por otro lado, a resolver la ecuación para la probabilidad sin proponer aproximaciones locales.

Volviendo a la ecuación 1.53, a pesar de que el acoplamiento del movimiento de la partícula a su entorno en general puede ser complejo dependiendo del origen del nado, nos limitaremos a analizar las situaciones en las que una partícula nada a una velocidad constante  $v$  en un fluido viscoso en números de Reynolds<sup>1</sup>

---

<sup>1</sup>Número adimensional utilizado en mecánica de fluidos.  $Re = \rho L v / \eta$ , donde  $\rho$  y  $\eta$  son respectivamente la densidad y viscosidad del fluido,  $L$  una longitud característica donde ocurre el flujo y  $v$  la velocidad de la partícula. Su valor indica si el flujo sigue un modelo laminar o

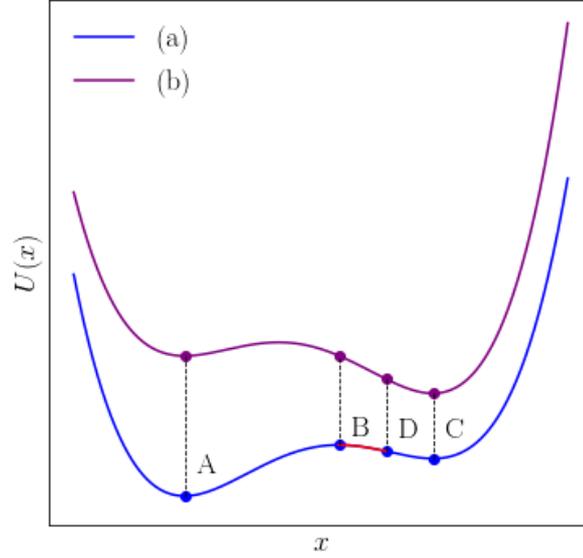


Figura 1.6: (a) Potencial de doble pozo donde C es metaestable relativo a A. (b) La sección BD ha sufrido un calentamiento de manera que el perfil del potencial en D es comparable con el potencial en B, lo cual produce una metaestabilidad en A relativa a la estabilidad de C.

bajos ( $Re \ll 1$ ), tal que la dinámica sobreamortiguada de Langevin es válida. También suponemos que la tasa de cambio de dirección  $\alpha$  es simétrica y constante  $\alpha_R(x) = \alpha_L(x) = \alpha$  y que la dirección del movimiento está restringida por un potencial externo  $U(x)$ . Bajo estas consideraciones las velocidades de nado son dependientes del espacio y dadas por:

$$\begin{aligned} v_R(x) &= v - \mu U'(x), \\ v_L(x) &= v + \mu U'(x), \end{aligned} \quad (1.58)$$

donde  $\mu$  por simplicidad se supone constante. Bajo estas consideraciones la ecuación 1.55 puede ser reescrita como:

$$T(x) = T_0 \left[ 1 - \frac{v_d(x)^2}{v^2} \right], \quad (1.59)$$

donde:

---

turbulento.

## 1. INTRODUCCIÓN.

### MATERIA ACTIVA Y MOVIMIENTO BROWNIANO

---

$$T_0 = \frac{v^2}{\alpha\mu k_B}, \quad (1.60)$$

juega el papel de la temperatura de un baño térmico ficticio en el cual se encuentra inmersa la partícula activa (en el límite de tiempos largos) bajo un proceso enteramente difusivo (sin potencial externo) (27). Reescrita como  $k_B T_0 = (\alpha\mu)^{-1}v^2$ , podemos pensar en que esta temperatura está asociada a una temperatura efectiva dada por la energía cinética proveniente por la velocidad de nado  $v$ , con una masa efectiva igual a  $(\alpha\mu)^{-1}$  (término inercial).

Finalmente es posible reescribir la ecuación 1.53 en términos de un potencial efectivo y la temperatura efectiva:

$$P_{\text{est}}(x) = Z^{-1} \exp \left[ - \int^x dx' \frac{U'_{\text{ef}}(x')}{k_B T(x)} \right]. \quad (1.61)$$

Dicho potencial efectivo está definido como:

$$U_{\text{ef}}(x) = U(x) + k_B T(x). \quad (1.62)$$

El cual toma en consideración la aparición de la fuerza termoforética  $-k_B T'(x)$  (31) causada por la inhomogeneidad espacial de la temperatura efectiva y dada explícitamente por:  $k_B T'(x) = (2k_B T_0 \mu^2 / v^2) U'(x) U''(x)$ . A su vez, la constante de normalización  $Z$  (función de partición en el ensamble canónico) está dada explícitamente por:

$$Z = \int dx \exp \left[ - \int^x dx' \frac{U'_{\text{ef}}(x')}{k_B T(x')} \right], \quad (1.63)$$

donde la integral es sobre todo el dominio de la partícula. Es importante notar que en el régimen de persistencia el movimiento de la partícula tiene en límites finitos  $x_{\text{mín}}, x_{\text{máx}}$  dependientes del potencial externo. Dichos límites ocurren cuando la fuerza de autopropulsión  $\mu^{-1}v$  es igual a la fuerza de atrapamiento  $-U'(x_{\text{mín}/\text{máx}})$ ; esto ocurre en distintos puntos ( $x_{\text{mín}} \neq -x_{\text{máx}}$ ) si el potencial no es simétrico alrededor del origen. El efecto de los límites del dominio puede observarse también en la dependencia de la temperatura con la velocidad de deriva  $v_d$ . Dado que nos interesa una temperatura efectiva positivo definida, los límites satisfacen  $T(x) = T_0 [1 - v_d(x)^2 / v^2] > 0$ , para  $x \in (x_{\text{mín}}, x_{\text{máx}})$ .

### 1.2.2. Adimensionalización de las ecuaciones

Es posible, de manera genérica, redefinir las posiciones, los potenciales y la temperatura de forma adimensional, lo cual es útil para explorar distintos regímenes en las ecuaciones del *run and tumble* con el menor número de parámetros necesarios y también para implementar en ellas métodos numéricos. Siendo  $x = x^*/L$ ,  $U(x) = U^*(x)/\epsilon$  y:

$$T(x) = \frac{T(x)}{T_0} = 1 - \left(\frac{\mu\epsilon}{vL}\right)^2 U'(x)^2 = 1 - g_1^{-2} U'(x)^2, \quad (1.64)$$

donde el superíndice \* denota a las cantidades con dimensiones físicas. Por otra parte  $L$  y  $\epsilon$  son unidades de medida características del potencial (externas) y el parámetro  $g_1 = vL/\mu\epsilon$ , representa la razón del trabajo  $vL/\mu$  que la partícula activa realiza al moverse una distancia  $L$  y de la energía  $\epsilon$  de atrapamiento.

El potencial efectivo adimensional se define de manera similar al potencial:

$$U_{\text{ef}}(x) = \frac{U_{\text{ef}}^*(x)}{\epsilon} = U(x) + \frac{k_B T_0}{\epsilon} T(x) = U(x) + g_2^{-1} T(x). \quad (1.65)$$

En este caso,  $g_2 = \epsilon/k_B T_0$  mide la razón de la energía de confinamiento  $\epsilon$  y la energía de persistencia  $k_B T_0$ . Recordemos que  $T_0$  es a su vez la razón de la energía cinética ( $\propto v^2$ ) y la tasa de cambio de dirección  $\alpha$  (ecuación 1.60). Mayor velocidad o menor tasa de cambio se asocian con mayor energía proveniente de la actividad, pues en detalle, una partícula individual recorre más distancia en línea recta antes de un cambio de dirección (*tumble*), lo cual se encuentra lejos de un comportamiento pasivo. Valores grandes de  $g_2$  representan casos en donde la energía de confinamiento es mayor que la energía activa, tendiendo a un comportamiento pasivo.

Por último, la distribución de probabilidad estacionaria se reescribe como:

$$P(x) = Z^{-1} \exp \left[ -g_2 \int^x dx' \frac{U'_{\text{ef}}(x')}{T(x')} \right], \quad (1.66)$$

donde  $Z$  es nuevamente la función de partición, obtenida de integrar 1.66 en todo el dominio, e igualarla a 1. En los capítulos 3, 4 y 5 integraremos esta ecuación numéricamente para hallar las distribuciones de probabilidad dadas por los distintos potenciales externos. En el capítulo 2, veremos que es posible dar una expresión cerrada para  $P(x)$ .

### 1.3. Puntos atractores, repulsores y condiciones de estabilidad

En el ámbito de los sistemas dinámicos, dado un conjunto dominio,  $A$  y una función de evolución  $f$ , es posible definir a un punto atractor  $x_0$  en  $A$  como a un elemento al que los valores de la función se aproximan a medida que incrementa cierto parámetro  $t$ , el cual puede ser el tiempo si el sistema es continuo o, iteraciones si el sistema es discreto.

Formalmente esto se traduce a  $f(t, x_0) = x_0$ , y a la existencia de  $V \subseteq A$ , donde  $V$  es un subconjunto abierto que contiene a  $x_0$ , tal que  $f(V \cap A) \subset V \cap A$  donde para todo elemento  $x \in V \cap A$ ,  $\lim_{t \rightarrow \infty} f(t, x) = x_0$ . De manera análoga, se define a un punto repulsor  $x_0$  si existe  $V$ ,  $x_0 \in V$  tal que para cada  $x \in V \cap A$ ,  $x \neq x_0$ , existe  $t$  tal que  $f(t, x) \notin V \cap A$ .

Cuando se trata de un sistema estocástico, como es el caso de las partículas autopropulsadas, no es posible satisfacer la condición determinista  $f(t, x_0) = x_0$ , sin embargo, se sabe que dado un potencial, existen posiciones preferenciales en el dominio espacial de las partículas. Aunado a esto, el enfoque empleado nos permite conocer la distribución espacial  $P = P(x)$  de una partícula en el régimen estacionario. Por ello definiremos a un punto atractor como un máximo global o local de la función de distribución, y a los puntos repulsores como los mínimos, globales o locales, de la misma.

La motivación reside en el hecho de que, desde el punto de vista de la ecuación de Langevin, la posición de una partícula autopropulsada en la vecindad de un máximo local,  $x_0$  de  $P$ , tenderá a mantenerse cercano, sin embargo, las fluctuaciones aleatorias provenientes de colisiones con partículas del medio circundante evitarán el estancamiento en un único punto.

Es posible hallar los puntos críticos (máximos, mínimos y de inflexión) de la función de distribución  $P$ , a partir de la ecuación diferencial que satisface en el límite estacionario, igualándola a cero,

$$\frac{d}{dx}P(x) = -P(x)\frac{U'_{\text{ef}}(x)}{k_B T(x)} = 0. \quad (1.67)$$

Observemos que los puntos críticos son ceros de la función de distribución o puntos críticos del potencial efectivo. Para conocer si son mínimos, máximos o puntos de inflexión, tomamos la segunda derivada:

$$\frac{d^2}{dx^2}P(x) = -P'(x)\frac{U'_{\text{ef}}(x)}{k_B T(x)} - P(x)\frac{U''_{\text{ef}}(x)}{k_B T(x)} + P(x)U'_{\text{ef}}(x)\frac{T'(x)}{k_B T^2(x)}. \quad (1.68)$$

Evaluado en un punto crítico el primer y tercer término de la suma siempre se desvanecen. Si el punto crítico es tal que  $P(x) = 0$ , entonces el criterio de la segunda derivada no es concluyente; sin embargo, veremos más adelante que este no es un caso relevante al estudiar los distintos potenciales de atrapamiento. De esta manera la naturaleza de los puntos críticos están directamente relacionados con la naturaleza de los puntos críticos del potencial efectivo. El signo menos en el término nos indica que si un punto crítico en el potencial efectivo es máximo, se traduce a un mínimo en la función de distribución y viceversa.

Empleando las ecuaciones 1.64 y 1.65 la condición de puntos críticos del potencial efectivo es:

$$U'_{\text{ef}}(x) = U'(x) [1 - 2g_2^{-1}g_1^{-2}U''(x)] = 0. \quad (1.69)$$

Esto significa que todos los puntos críticos del potencial externo son también puntos críticos del potencial efectivo y por tanto, de la función de distribución. Nótese que debido a la actividad proporcionada por la temperatura efectiva, se tienen puntos críticos adicionales expresados en las raíces del segundo factor de la ecuación anterior.

Supongamos ahora que  $x_c$  es un punto crítico de  $U(x)$ , entonces  $T(x_c) = 1$ , lo cual siempre corresponde a un máximo. Si originalmente  $x_c$  es un máximo del potencial seguirá siéndolo en el potencial efectivo, es decir que los puntos inestables de un potencial lo son sin importar la actividad de la partícula. No obstante, si es mínimo se tiene una competencia entre atrapamiento y actividad. Esto depende del signo de la segunda derivada del potencial efectivo,  $U''_{\text{ef}}(x) = U''(x) + g_2^{-1}T''(x)$ , donde  $T''(x) = -2g_1^{-2}U''(x)^2 - 2g_1^{-2}U'(x)U'''(x)$ . Evaluando la segunda derivada del potencial efectivo en un punto crítico del potencial tenemos:

$$U''_{\text{ef}}(x_c) = U''(x_c) [1 - 2g_2^{-1}g_1^{-2}U''(x_c)]. \quad (1.70)$$

Un primer aspecto importante es que la naturaleza de los puntos críticos (mínimos) dependen en este caso de un único parámetro  $k = 2g_2^{-1}g_1^{-2}$ . Además, la función definida como  $U''_{\text{ef}}(k, x_c) = U''(x_c)[1 - kU''(x_c)]$  tiene tantos valores críticos  $k^c$  como mínimos  $x_c$  presentes en  $U(x)$ . Entenderemos valores críticos como aquellos en los que  $U''_{\text{ef}}(k, x_c) = 0$ , pues son los que delimitan los intervalos de  $k$  donde  $U''(x_c)$  cambia de signo y por tanto, donde ocurren transiciones de puntos a repulsores a puntos atractores.

## 1. INTRODUCCIÓN.

### MATERIA ACTIVA Y MOVIMIENTO BROWNIANO

---

Más adelante, optaremos por mantener  $g_1$  y  $g_2$  como parámetros independientes debido a que en general, no es posible describir al potencial efectivo en términos de un único parámetro  $k$ .

# Movimiento activo confinado por un potencial armónico

---

El objetivo de esta investigación es determinar las propiedades de la función de distribución de posiciones de una partícula autopropulsada bajo un potencial armónico con perturbaciones de estructura jerárquica. Emplearemos dos modelos usados para introducir efectos de rugosidad en el atrapamiento. Ambos modelos son de la forma  $U(x) = x^2/2 + V(x)$ , donde  $V(x)$  es una perturbación de estructura fractal. Se elige un potencial armónico por tratarse de un potencial arquetípico en física, pero más importante, es que existen estudios teóricos (numéricos y analíticos) (32, 33) y experimentales de materia activa (34, 35, 36), sobre los efectos de la actividad en partículas activas bajo confinamiento.

Antes de inmiscuirse en los efectos de  $V(x)$  en el potencial efectivo, temperatura y distribución de probabilidad, es conveniente estudiar una serie de características relevantes y comunes a nuestros modelos. Entre ellas, el dominio donde la partícula se difunde como función de los parámetros  $g_1$  y  $g_2$ , efectos del atrapamiento cuadrático ( $V(x) = 0$ ), efectos de puntos metaestables y de asimetría dentro del potencial (siguiente capítulo) y la equivalencia entre el modelo *run and tumble* y la dinámica de Langevin con una temperatura efectiva no homogénea.

## 2.1. Temperatura y potencial efectivos

La temperatura efectiva asociada a un potencial armónico externo,  $U(x) = x^2/2$ , tiene la característica de ser igualmente cuadrática,  $T(x) = 1 - g_1^{-2}x^2$  (ver la ecuación 1.64). Lo primero que es importante recalcar, es que, como mencionamos en el capítulo previo, la temperatura efectiva no es positiva definida en el

## 2. MOVIMIENTO ACTIVO CONFINADO POR UN POTENCIAL ARMÓNICO

---

dominio natural del potencial.  $T(x)$  es positiva definida en el intervalo  $(-g_1, g_1)$  y en los puntos  $\pm g_1$  la temperatura es nula. Esto implica que por parte de la fuerza termoforética (proveniente de la velocidad de nado y la tasa de cambio de dirección) no esperamos movimiento alguno en la partícula en  $\pm g_1$ , por lo que en estos puntos se espera acumulación de partículas. Esto no es decisivo en la forma que tomará la función de distribución de las partículas bajo el potencial armónico, pues dado que las ecuaciones describen partículas activas que comienzan a difundirse en el origen, para ciertos valores del parámetro de nado  $g_2$ , el nado no será suficiente para llegar a los puntos de temperatura nula.

El valor máximo de la temperatura se alcanza en el origen, donde  $T(x = 0) = T_0$ , la temperatura efectiva en difusión libre (o en el caso adimensional que es el que usaremos a lo largo de la tesis  $T(0) = 1$ ), resultando en una fuerza de desplazamiento repulsiva en el origen. Es precisamente la oposición de fuerza termoforética a la fuerza derivada del potencial lo que previene el movimiento más allá de  $\pm g_1$ . A partir de ahora, nos limitaremos a estudiar los efectos de los potenciales para valores de  $x$  tales que  $T(x|g_1) > 0$ . Como ya se mencionó, en este caso el dominio es simétrico y dado por el intervalo abierto  $(-g_1, g_1)$ .

Dado que el potencial efectivo es la suma de la temperatura y el potencial externo, éste es cuadrático también:

$$U_{\text{ef}}(x) = \frac{1}{2}x^2 \left[ 1 - \frac{2}{g_2 g_1^2} \right] + \frac{1}{g_2}. \quad (2.1)$$

La derivada del potencial efectivo, la cual está asociada con la probabilidad, es:

$$U'_{\text{ef}}(x) = x \left[ 1 - \frac{2}{g_2 g_1^2} \right]. \quad (2.2)$$

Podemos observar que  $x = 0$  es el único punto crítico en el dominio. La segunda derivada  $U''_{\text{ef}}(x) = 1 - 2/(g_2 g_1^2)$  es una constante cuyo signo nos dice si el origen es un punto atractor o repulsor, de acuerdo con la definición del capítulo 1. Si  $g_2 g_1^2 < 2$ , entonces  $U_{\text{ef}} < 0$ , por lo que el origen es un punto repulsor y hay acumulación de partículas en  $\pm g_1$ . Por otra parte, si  $g_2 g_1^2 > 2$ , el origen es atractor, lo que nos indica que el nado no es suficiente para llegar a las fronteras del confinamiento.

En el caso donde  $g_2 g_1^2 = 2$ , el potencial efectivo pierde su dependencia espacial tomando un valor constante,  $U_{\text{ef}} = 1/g_2$ . Recordemos que la probabilidad adquiere su dependencia en  $x$  a través de la integral del cociente  $U'_{\text{ef}}(x)/T(x)$ , por lo que siendo la derivada del potencial efectivo igual a cero, se obtiene una densidad de probabilidad uniforme dada por  $P(x) = 1/(2g_1)$ .

Anteriormente definimos los valores críticos de  $g_2$  como aquellos donde un

punto crítico del potencial externo cambia de naturaleza (atractora o repulsora) en el potencial efectivo. Al tener un único punto crítico en el potencial externo, se tiene también un único valor crítico de  $g_2$ , en este caso:  $g_2^c = 2$ .

## 2.2. Distribución de probabilidad

El potencial armónico simple es uno de los potenciales en los cuales es posible dar una expresión analítica para la función de distribución estacionaria. El factor  $-g_2 U'_{\text{ef}}(x)/T(x)$  que aparece en la ecuación 1.66 es integrable y está dado por:

$$-g_2 \int \frac{U'_{\text{ef}}(x')}{T(x')} dx' = -(g_2 g_1^2 - 2) \int \frac{x}{g_1^2 - x^2} dx = \left( \frac{1}{2} g_2 g_1^2 - 1 \right) \log(g_1^2 - x^2). \quad (2.3)$$

Entonces, la función de distribución está dada por  $P(x) = Z^{-1}(g_1^2 - x^2)^{g_2 g_1^2/2-1}$ , la cual puede ser reescrito como:

$$P(x) = \frac{1}{Z} \left[ 1 - \left( \frac{x}{g_1} \right)^2 \right]^{g_2 g_1^2/2-1}, \quad (2.4)$$

donde el término constante se ha absorbido en la función de partición  $Z$ . Para hallar el valor de la función de partición es necesario integrar la función de distribución en el dominio bajo la condición que el valor total de la probabilidad es igual uno:

$$\begin{aligned} Z &= \int_{-g_1}^{g_1} \left[ 1 - \left( \frac{x}{g_1} \right)^2 \right]^{g_2 g_1^2/2-1} dx = 2g_1 \int_0^1 (1 - y^2)^{g_2 g_1^2/2-1} dy \\ &= \frac{g_1 \sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{g_2 g_1^2}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{g_2 g_1^2}{2} + \frac{1}{2}\right)}, \end{aligned} \quad (2.5)$$

donde  $\Gamma$  representa a la función Gamma. A continuación mostramos la gráfica de las funciones de distribución para distintos valores de  $g_2 g_1^2$ . La líneas continuas en el panel izquierdo indican el valor analítico y los puntos en el panel derecho indican la altura de barras de un histograma obtenido de integrar la ecuación de Langevin para un ensamble de  $100$  partículas en  $3 \times 10^5$  pasos de tiempo (Apéndice A), con el potencial externo y la temperatura efectiva dada por la

## 2. MOVIMIENTO ACTIVO CONFINADO POR UN POTENCIAL ARMÓNICO

teoría (1.59).

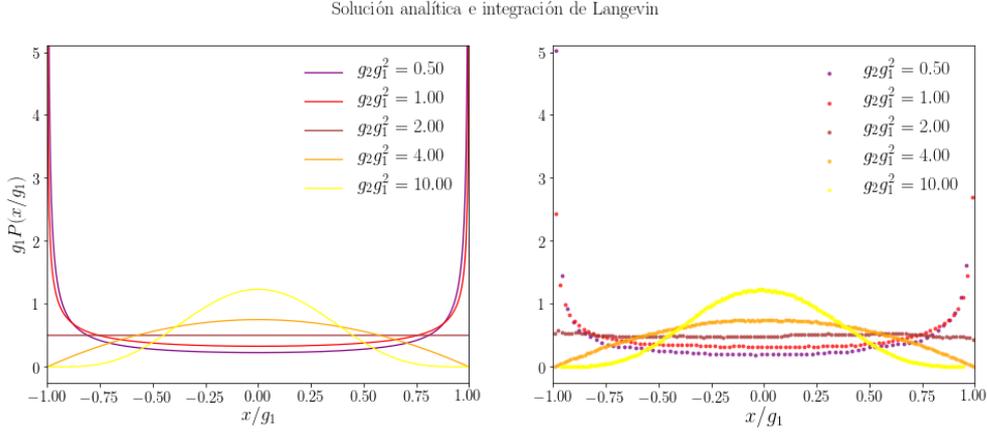


Figura 2.1: Funciones de distribución de  $x$ , calculados analíticamente y mediante simulaciones moleculares para distintos valores de  $g_2g_1^2$ .

Dado que siempre es posible reescalar el intervalo con  $g_1$ , el cambio de la geometría de  $(x, P(x))$  está dado únicamente por  $g_2$ . En particular esto implica, que en un montaje experimental, el tamaño del dominio donde se logre el confinamiento armónico no influye directamente en el tipo de exploración de las partículas, es decir, exploración de las fronteras del confinamiento o el centro del mismo (concavidad de  $P(x)$ ), siendo el factor predominante la intensidad del confinamiento,  $\epsilon$  (suponiendo fijo el valor de la velocidad de la partícula  $v$ ). Recordemos que  $g_2 = \epsilon/(k_B T_0)$ , donde  $T_0 = v^2/(\alpha \mu k_B)$  es la temperatura efectiva de una partícula activa en el caso enteramente difusivo, proveniente de la actividad de la partícula. Como se mencionó, por debajo del valor crítico, cuando la energía de confinamiento  $\epsilon$  es menor que  $v^2/\alpha$ , el origen es un punto repulsor, pues la partícula tiene velocidad suficiente para explorar todo el dominio o su tasa de cambio de dirección ( $\alpha$ ) es lo suficientemente baja para moverse en una única dirección hasta los límites del confinamiento. En este caso sabemos que no se tienen más puntos críticos dentro del dominio. Por lo que la función aumenta o disminuye monótonamente hacia los extremos, dependiendo si el centro es repulsor o atractor respectivamente. Esto sugiere que los extremos también son máximos o mínimos de  $P(x)$  pero fuera del dominio.

En el valor crítico se tiene una distribución uniforme, pues los efectos del ruido anulan en todo punto los efectos del potencial externo. Por encima, se tiene un punto atractor en el origen, ya que ahora la energía de confinamiento es mayor que la energía cinética de la partícula. En particular, fijándonos solo en las modas (máximos) de  $P$ , si comenzamos con  $g_2g_1^2 > 2$  contamos con una única moda en el origen, en 2 dicha moda se degenera en todo el intervalo (probabilidad uniforme) y

para  $g_2 g_1^2 < 2$ , dos modas se encuentran en cada extremo del intervalo, obteniendo un esquema de bifurcación modal proveniente de un intervalo acotado.

En la literatura (27) se ha recalado la tendencia asintótica de la distribución de probabilidad 2.4 a la distribución de Boltzmann-Gibbs. En efecto, definiendo:

$$q = \frac{g_2 g_1^2 / 2 - 2}{g_2 g_1^2 / 2 - 1}, \quad (2.6)$$

la función de distribución estacionaria puede reescribirse como una distribución  $q$ -Gaussiana (37):

$$P(x) = Z^{-1} \exp_q [-x^2 g_2 / 2], \quad (2.7)$$

donde  $\exp_q(u)$  es una función  $q$ -exponencial, definida como:

$$\exp_q(u) = \left[ 1 + \left( \frac{1-q}{2-q} \right) u \right]^{\frac{1}{1-q}}. \quad (2.8)$$

En el límite de  $q \rightarrow 1$  ( $g_2 g_1^2 / 2 \rightarrow \infty$ ),  $\exp_q(u) \rightarrow \exp(u)$ , marcando una medida de separación del equilibrio (Boltzmann-Gibbs) en función de los parámetros de nado y confinamiento. Este límite representa el crecimiento del trabajo que realiza la partícula al desplazarse una longitud  $L$  ( $W = vL\mu^{-1}$ ), contra la energía de confinamiento ( $\epsilon$ ) y crecimiento de de la energía de confinamiento  $\epsilon$  respecto a la energía térmica (efectiva)  $k_B T_0$ . Básicamente es el límite donde la actividad de la partícula es despreciable respecto al potencial externo (límite pasivo).



# Movimiento activo confinado por un potencial biestable asimétrico

---

Como se mencionó anteriormente, el objetivo es estudiar los efectos de un potencial con varios mínimos locales dentro de una estructura global. Así que otro aspecto importante son las asimetrías causadas por puntos metaestables dentro de un potencial. Un ejemplo es el doble pozo asimétrico. La característica de cualquiera de estos potenciales es la presencia de dos mínimos, uno global y otro local (o metaestable). Los potenciales de doble pozo suelen encontrarse en la transición de estados en reacciones químicas<sup>1</sup> cuando existe cuasi-equilibrio entre reactivos, estados intermedios y productos, tal como ocurre en la reducción de disulfuros alifáticos por fosfinas en medios acuosos (38). En ese ejemplo, el doble pozo asimétrico representa la existencia de dos configuraciones de un reactivo, una más estable que la otra (en términos de energía interna del reactivo químico) y que sin embargo, gracias a modificaciones externas (por temperatura, catalizadores, enzimas, entre otros) la probabilidad de pasar de estados estables a metaestables (y vice versa) no es nula. Esto es una motivación para estudiar qué ocurre en sistemas que se encuentran bajo constricciones energéticas de doble pozo cuando las transiciones entre los mínimos es posibles. En las partículas activas los parámetros que permiten la transición entre los mínimos del potencial de doble pozo asimétrico son los parámetros de nado,  $g_1$  y  $g_2$ , cuyos efectos caracterizaremos para el potencial propuesto a continuación.

En la siguiente ecuación optamos por una definición polinomial de cuarto orden, donde en el origen existe un máximo local de naturaleza cuadrática y la asimetría está dada por un término cúbico dependiente de un parámetro  $a$ :

---

<sup>1</sup>Esto es estudiado por la teoría de transición de estados, la cual explica las tasas de reacciones químicas elementales

### 3. MOVIMIENTO ACTIVO CONFINADO POR UN POTENCIAL BIESTABLE ASIMÉTRICO

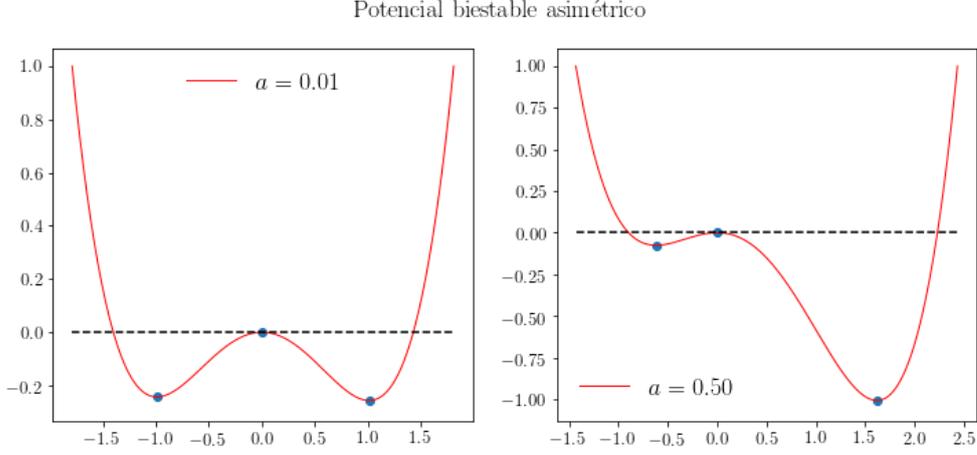


Figura 3.1: La posición relativa y profundidad de los mínimos del potencial (puntos) dependen fuertemente del parámetro de asimetría, teniendo un potencial biestable simétrico cuando  $a = 0$

$$U(x) = \epsilon \left[ \frac{1}{4} \left( \frac{x}{L} \right)^4 - \frac{2}{3} a \left( \frac{x}{L} \right)^3 - \frac{1}{2} \left( \frac{x}{L} \right)^2 \right], \quad (3.1)$$

donde  $L$  es una distancia característica entre los puntos de estabilidad del potencial. Dichos puntos son  $x_1/L = a + \sqrt{a^2 + 1}$  y  $x_2/L = a - \sqrt{a^2 + 1}$ . Si  $a = 0$ , entonces los puntos se encuentran igualmente espaciados en  $x_i = \pm L$ . En el potencial armónico no existían los dos mínimos, por lo que la interpretación de  $L$  no es la misma; sin embargo, se tiene consistencia en que  $L$  representa una distancia característica del potencial externo y no del nado.

En la figura 3.1 observamos la dependencia de la asimetría con el parámetro  $a$ . Dicha asimetría es cuantificable en la profundidad relativa de los mínimos y en la distancia del origen a ellos.

La forma adimensional de dicho potencial es  $U(x) = x^4/4 - 2ax^3/3 - x^2/2$ . Recordemos que siempre se puede pasar de la expresión física a la expresión adimensional sin perder información. Siguiendo la definición de temperatura efectiva en 1.59 la temperatura efectiva de este potencial es:

$$T(x) = 1 - g_1^{-2} (x^3 - 2ax^2 - x)^2. \quad (3.2)$$

La expresión general para los puntos críticos de la temperatura efectiva,  $T'(x) \propto U'(x)U''(x) = 0$ , ahora guarda más información que en el caso del potencial armónico. Para un polinomio de segundo grado,  $U''(x) = \text{constante}$ . Sin embargo, para cualquier otra función, la segunda derivada del potencial puede contribuir

con más puntos críticos en el potencial efectivo, y por consiguiente, en la distribución de probabilidades. Los nuevos puntos críticos provenientes de  $U''(x)$  son  $x_3 = 2a/3 - \sqrt{4a^2 + 3}/3$  y  $x_4 = 2a/3 + \sqrt{4a^2 + 3}/3$ .

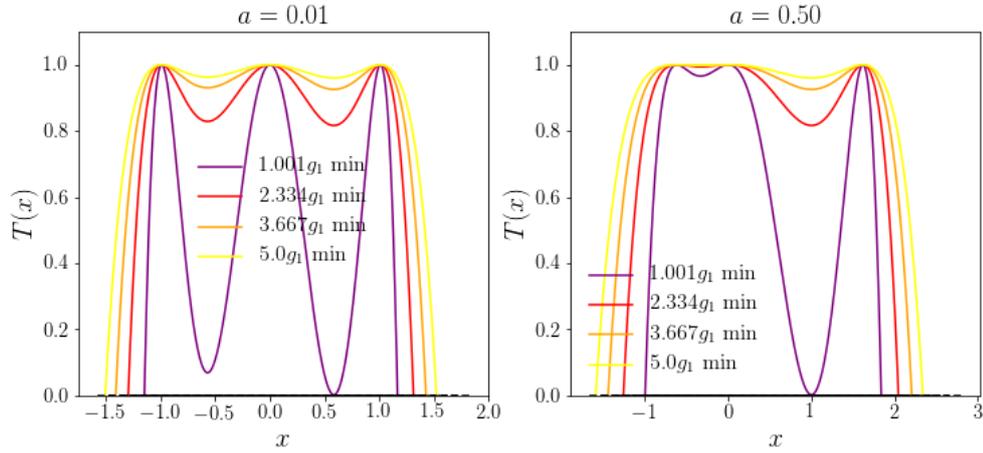


Figura 3.2: Perfil de temperaturas para distintos valores de  $a$  y  $g_1$ . A medida que  $g_1$  disminuye, el mínimo global de la temperatura efectiva se acerca más a cero. Esto sugiere que existe un  $g_1$  mín para el cual este mínimo de la temperatura se mantiene positivo.

En los perfiles de temperatura en la figura 3.2 se recalca una propiedad que aparecerá también en los potenciales rugosos, la existencia de valores mínimos de  $g_1$  para cada valor del parámetro de asimetría. Como se observa en las gráficas en 3.2, cuando los valores de  $g_1$  aumentan, el mínimo global de la temperatura decrece hasta llegar a cero. Cuando la temperatura se anula en algún punto, marca fronteras en la difusión de las partículas. En este caso el punto donde la temperatura se anula separa a los dos mínimos locales, obteniendo confinamientos en ambos sin posibilidad de migrar entre ellos. Esto no es de interés, pues aunque no es idéntico al atrapamiento cuadrático, se espera un comportamiento análogo para el confinamiento local de los mínimos. Por ello, fijado un valor de  $a$ , hallamos el valor mínimo de  $g_1$ , tal que  $T(x_c) > 0$  ( $x_c$ , punto crítico de la temperatura). En la gráfica 3.2 estos valores se denotan como  $g_1$  mín.

El potencial efectivo  $U_{\text{ef}}(x) = U(x) + g_2^{-1}T(x)$  contiene en ambos sumandos los puntos críticos del potencial original. Sin embargo, dada la dependencia  $-U'(x)^2$  en la definición de la temperatura, los puntos críticos de  $U(x)$  siempre serán máximos de la temperatura, pues  $U'(x) = 0$ . La forma explícita del potencial efectivo es:

### 3. MOVIMIENTO ACTIVO CONFINADO POR UN POTENCIAL BIESTABLE ASIMÉTRICO

$$U_{\text{ef}}(x) = \frac{1}{4}x^4 - \frac{2}{3}ax^3 - \frac{1}{2}x^2 + g_2^{-1} \left[ 1 - g_1^{-2} (x^3 - 2ax^2 - x)^2 \right]. \quad (3.3)$$

A continuación mostramos las distintas geometrías del potencial efectivo para varios valores del parámetro de asimetría  $a$ , y de  $g_1$ , a través de los valores críticos de  $g_2$ . Dado que el potencial externo posee dos mínimos locales, ahora tendremos dos valores críticos de  $g_2$ , uno para cada mínimo de  $U(x)$ .

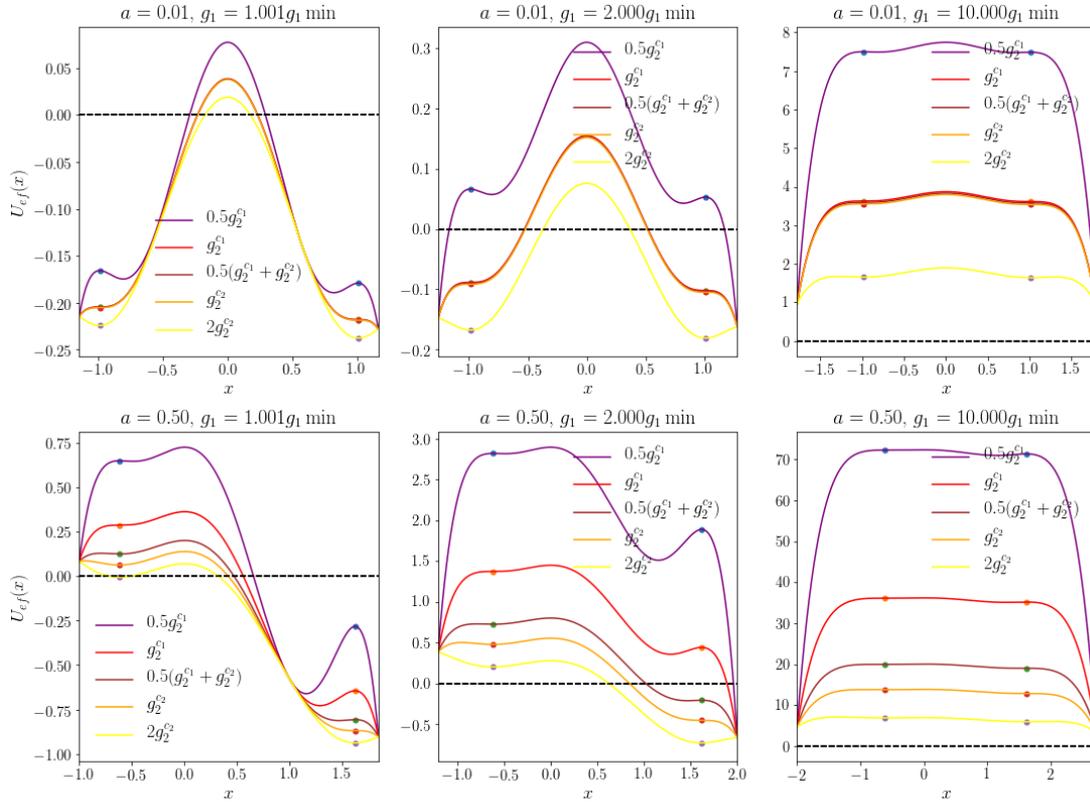


Figura 3.3: Potencial efectivo para el doble pozo asimétrico con distintos valores de  $a$ ,  $g_1$  y  $g_2$ . Las tres gráficas del panel superior corresponden a un valor de asimetría  $a = 0.01$  y las tres gráficas del panel inferior corresponden a valores de  $a = 0.5$ . De izquierda a derecha cada gráfica presenta valores ascendentes de  $g_1$  como múltiplos de  $g_1$  mínimos.

Como es de esperarse, por debajo de ambos valores críticos de  $g_2$ , los mínimos

de  $U(x)$  son máximos locales del potencial efectivo, los cuales se vuelven puntos de inflexión en  $g_2^{c1}$  y  $g_2^{c2}$ , respectivamente. Cuando la asimetría es pequeña (panel superior), los valores críticos de  $g_2$  son cercanos entre sí y las transiciones de máximos a mínimos ocurren casi simultáneamente, como puede observarse en las gráficas para  $g_2^{c1}$ ,  $0.5(g_2^{c1} + g_2^{c2})$  y  $g_2^{c2}$ . Las transiciones son más notorias para  $g_1 \approx g_1 \text{ mín}$  con  $a = 0.50$ .

### 3.1. Distribución de probabilidad

En el caso de difusión pasiva, la probabilidad relativa a los puntos de equilibrio de potencial es fija y dependiente de la diferencia de energías en ambos puntos  $\Delta U$ , lo cual es el cociente de los factores de Boltzmann en cada punto,  $\exp[-\Delta U/(k_B T)]$  1.29.

Ahora, en el caso activo, sabemos de antemano que los parámetros  $g_1$  y  $g_2$  cambian la geometría del potencial y temperatura efectivos. Observamos que para valores de  $g_1 \gg g_1 \text{ mín}$ , los efectos de la asimetría, sin importar el valor de  $a$ , disminuyen.

### 3. MOVIMIENTO ACTIVO CONFINADO POR UN POTENCIAL BIESTABLE ASIMÉTRICO

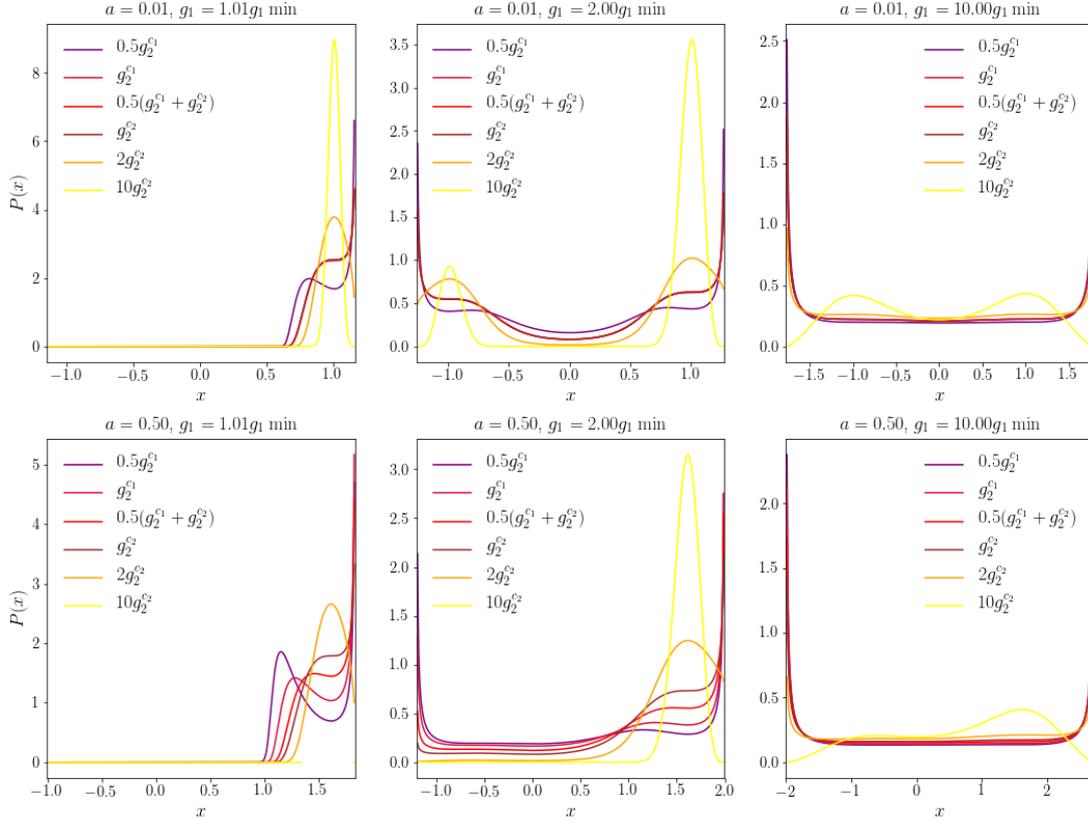


Figura 3.4: Perfiles de probabilidad para distintos valores de  $a$ ,  $g_1$  y  $g_2$ . Las gráficas en el panel superior tiene valores de  $a = 0.01$  y las del panel inferior,  $a = 0.5$ . Para ambos paneles a medida que  $g_1$  crece (de izquierda a derecha) la asimetría decrece.

En la figura 3.4 (gráficas obtenidas integrando numéricamente la ecuación 1.66), el panel superior ( $a = 0.01$ ) muestra que para longitudes de nado menores la longitud característica de las posiciones estables ( $g_1 \approx g_1 \text{ mín}$ ) el confinamiento ocurre casi exclusivamente en la región del mínimo local del potencial externo. Para valores de  $g_2 < g_2^{c2}$ , se alcanza una simetría para valores de  $g_1$  relativamente cercanos a  $g_1 \text{ mín}$ , sin embargo, cuando la energía de confinamiento se hace más fuerte que la fuerza termoforética, nuevamente se tienen marcadas diferencias en las probabilidades relativas de los puntos estables. Adicionalmente, observamos que para ambos valores de asimetría  $a = 0.01, 0.5$ , a valores grandes de  $g_1$  (trabajo contra energía de confinamiento) y de  $g_2$ , la actividad de las partículas no es suficiente para explorar los límites del dominio, ocurriendo lo contrario cuando  $g_2$  es pequeño comparado con los valores críticos  $g_2^{ci}$ .

Una forma de comprender la transición simétrico - asimétrico como función de  $g_2$ , podemos recurrir al tiempo de primer pasaje. Este está definido como el

tiempo  $t$  que le toma a una partícula activa en ir desde un punto  $x_i$  a un punto  $x_f$ . Los puntos de interés en este caso son los puntos mínimos del potencial externo (estable y metaestable) y el origen (punto máximo). Para ello generamos dos ensambles. En uno la partícula iniciaba siempre en el punto metaestable y en el segundo, en el estable y medimos el tiempo de cada partícula en llegar al origen. En la gráfica 3.5, mostramos las distribuciones de probabilidad para  $a = 0.01$  y  $g_2 = 2.00g_1$  mín obtenidas de la integración de la ecuación de Langevin (100 partículas,  $1 \times 10^5$  iteraciones con  $\Delta t 1 \times 10^{-4}$ ) y el tiempo de primer pasaje obtenido bajo las mismas condiciones.

En el histograma del tiempo de primer pasaje ignoramos los valores de  $g_2^{c1}$  y  $g_2^{c2}$  ya que prácticamente se superponen con  $g_2 = 0.5(g_2^{c1} + g_2^{c2})$ . Los marcadores “ $\times$ ” y “ $+$ ” corresponden al tiempo promedio de pasaje desde el punto estable y metaestable, al origen, respectivamente. Observamos el tiempo promedio de pasaje del punto estable ( $\langle t \rangle_1$ ) al origen es siempre mayor que del metaestable al origen ( $\langle t \rangle_2$ ). Sin embargo, en la gráfica embebida, se muestra que, para los tres primeros valores de  $g_2$ , los tiempos promedios se encuentran cercanos, en el mismo orden de magnitud, mientras que para el último valor de  $g_2$  existe una separación abrupta de 3 órdenes de magnitud entre  $\langle t \rangle_1$  y  $\langle t \rangle_2$ . La separación entre dichos promedios explica la transición de ligeramente asimétrico a altamente asimétrico en las distribuciones de probabilidad.

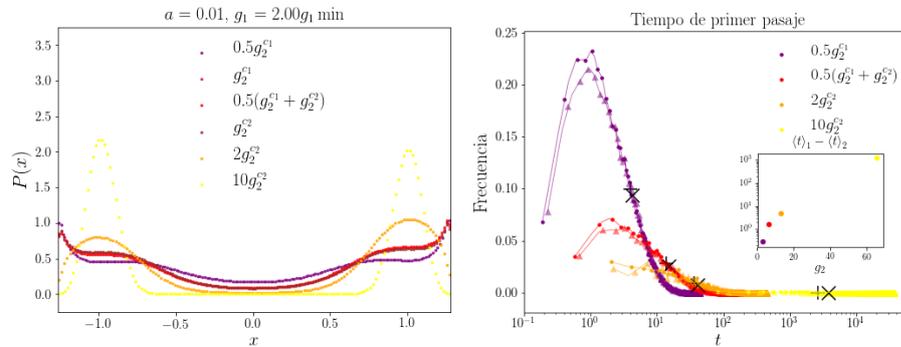


Figura 3.5: Distribuciones de probabilidad obtenidas de la integración de la ecuación de Langevin (izquierda). Distribución del tiempo del primer pasaje de los puntos críticos al origen (derecha). Los marcadores +, representan el tiempo promedio de primer pasaje desde el punto metaestable al origen y los marcadores  $\times$ , del punto estable al origen. La gráfica embebida indica la separación de ambos promedios como función de los valores de  $g_2$  de las acotaciones (el código de color coincide).



# Potenciales con estructura jerárquica I:

## Potencial de Zwanzig

---

En 1987, Zwanzig consideró el problema de difusión en un potencial de estructura rugosa (*rough potential*), es decir, con máximos y mínimos locales, superpuestos en un potencial armónico (39); intentando describir de manera simplificada los resultados de Frauenfelder et ál., refiriéndose al comportamiento dinámico del plegamiento de proteínas (40). En el artículo de Frauenfelder, se sugiere que la energía libre de Gibbs de distintos subestados conformacionales<sup>1</sup> de la mioglobina como función de una coordenada conformacional<sup>2</sup> ocurre en una serie de máximos y mínimos locales consecutivos, traducándose a que subestados y fluctuaciones en equilibrio poseen “jerarquías” energéticas.

Si bien en dichos potenciales los grados de libertad no corresponden a dimensiones espaciales de una partícula, motiva la pregunta de cómo ocurren otros procesos, en particular la difusión, cuando las constricciones energéticas tienen estructuras jerárquicas, presentando máximos y mínimos embebidos en otros máximos y mínimos.

El potencial propuesto por Zwanzig consiste en un potencial armónico con ondas sinusoidales de pequeña amplitud. En concreto, el potencial empleado en su artículo está dado por la ecuación:

$$U(x) = x^2 + 0.02 (\cos 167x + \sin 73x) \quad (4.1)$$

Cuyos máximos y mínimos locales están presentes en todo el dominio, como puede

---

<sup>1</sup> Mínimos de la energía libre de Gibbs (en coordenadas conformacionales) de un sistema termodinámico

<sup>2</sup>Coordenadas del conjunto mínimo de grados de libertad necesarios para describir un sistema termodinámico

#### 4. POTENCIALES CON ESTRUCTURA JERÁRQUICA I: POTENCIAL DE ZWANZIG

---

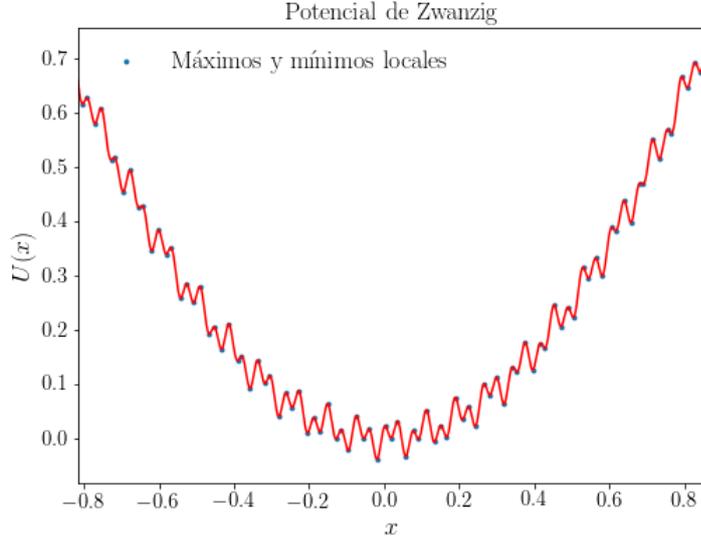


Figura 4.1: Potencial rugoso de Zwanzig

verse en la figura 4.1.

En el caso pasivo, la relación entre difusión y temperatura no es lineal, sino que presenta un comportamiento efectivo que escala exponencialmente con el factor de Boltzmann (39):

$$D_{\text{Efectivo}} = D_{\text{Browniano}} \exp \left[ - \left( \frac{\epsilon}{k_B T} \right)^2 \right], \quad (4.2)$$

en el caso donde las rugosidades siguen una distribución gaussiana, independientes de la posición  $x$ , con amplitud característica  $\epsilon$  (en el ejemplo tomado por Zwanzig,  $\epsilon = 0.02$ ). En la ecuación,  $D_{\text{Browniano}} = \mu k_B T$ , ( $\mu$  es la movilidad de la partícula en el medio) proviene de la relación de Einstein para movimiento Browniano 1.20 y la exponencial  $\exp [ - (\epsilon/k_B T)^2 ]$  implica que el atrapamiento local en las oscilaciones ocurre fuertemente cuando existe aumento en la energía promedio del potencial o un descenso en la temperatura. Por otra parte, como mencionamos en la introducción, debido al efecto Landauer, no esperamos hallar una relación local entre energía potencial, temperatura y difusión, mediante un factor tipo Boltzmann. Primeramente estudiaremos los efectos detallados de la estructura rugosa del potencial en la temperatura, en el potencial efectivo y en la probabilidad. Posteriormente analizaremos el efecto promedio (espacial) de la difusión como función de los parámetros  $g_1$  (velocidad y longitud de persistencia contra atrapamiento) y  $g_2$  (constricción energética contra temperatura efectiva), así como de la rugosidad misma del potencial externo.

## 4.1. Temperatura y potenciales efectivos en el potencial de Zwanzig

La temperatura efectiva induce una fuerza termoforética (ecuación 1.62), a su vez proveniente del efecto del movimiento activo. Físicamente podemos intuir que mientras más pliegues aparezcan en el potencial, la temperatura presentará más oscilaciones, en cuyos picos la fuerza termoforética será máxima y repulsiva, mientras que en sus valles será de atrapamiento, traducándose a dinámicas de nado y confinamiento alternantes. Matemáticamente, la alternancia proviene del doblamiento de la frecuencia de las oscilaciones en el potencial externo (debido a que se toma el cuadrado de la derivada del potencial externo).

$$U'(x) = 2x + 0.02 (73 \cos 73x - 167 \sin 167x) \quad (4.3)$$

$$T(x) = 1 - g_1^{-2} [2x + 0.02 (73 \cos 73x - 167 \sin 167x)]^2. \quad (4.4)$$

Dado que nos interesa averiguar los efectos de estructura fina (oscilaciones) sobrepuesto a un potencial que lo englobe una mayor escala, restringiremos los valores de  $g_1$ . Esto implica hallar el valor mínimo en el cual se evita el confinamiento dentro de una sola oscilación del potencial, tal como ocurrió en el caso del doble pozo asimétrico. Por un lado, para cada  $g_1$  nos interesa conocer  $x_{\min}$  y  $x_{\max}$  tal que  $T(x) > 0$  para  $x \in (x_{\min}, x_{\max})$ , es decir, el dominio donde la temperatura efectiva está bien definida, en función de  $g_1$ . A su vez, queremos saber cuál es el valor de  $g_1$  a partir del cual sólo exploramos estructuras de pequeña escala. El primer problema se resuelve acotando las oscilaciones. Para un  $g_1$  fijo, buscamos todos aquellos valores de  $x$  que satisfacen:

$$|2x + 0.02 (73 \cos 73x - 167 \sin 167x)| < g_1. \quad (4.5)$$

El dominio estará dado por:

$$x_{\max/\min} = \min / \max \{x | U'(x) = \pm g_1\}. \quad (4.6)$$

Sabemos que la derivada del potencial está acotada por una función lineal más (y menos) las amplitudes de las oscilaciones:

$$2x - 0.02(73 + 167) < 2x + 0.02 (73 \cos 73x - 167 \sin 167x) < 2x + 0.02(73 + 167) \quad (4.7)$$

#### 4. POTENCIALES CON ESTRUCTURA JERÁRQUICA I: POTENCIAL DE ZWANZIG

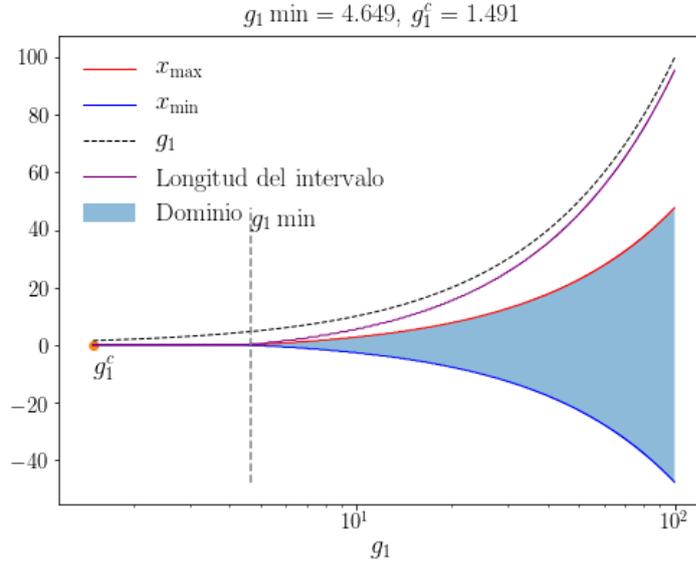


Figura 4.2: Valores máximos y mínimos de  $x$  como función de  $g_1$  (gráfica semilog en  $g_1$ ).

Estas dos funciones lineales acotan la región donde buscaremos las raíces  $U'(x) = \pm g_1$ . Resolviendo numéricamente la ecuación 4.2 para distintos valores de  $g_1$  podemos observar que el crecimiento del dominio tiene un comportamiento lineal a grandes escalas (figura 4.2).

El valor  $g_1^c$  al que se hace referencia en la figura corresponde a un valor de  $g_1$  por debajo del cual, en el origen se tiene un confinamiento en un máximo local del potencial. Esto implica una temperatura negativa en todo el intervalo y a pesar de que es posible moverse a la derecha o izquierda en el espacio, hasta el primer mínimo local, no es de interés estudiar estos casos, pues por expansión de Taylor, el potencial en estos puntos es cuadrático localmente.

El valor  $g_1 \text{ mín}$  es el valor de  $g_1$  a partir del cual se evitan las exploraciones locales. Esto es decidido de la siguiente manera: en la ecuación 4.2 se espera que  $x_{\text{máx}} > x_{\text{mín}}$ , porque este es el comportamiento que tendría una recta  $y = 2x$ ; sin embargo debido a atrapamientos locales puede ocurrir que  $x_{\text{máx}} < x_{\text{mín}}$ . El valor más grande de  $g_1$  donde ocurre esto es definido como  $g_1 \text{ mín}$ . En la gráfica 4.3 se muestra el comportamiento por arriba y por debajo del valor mínimo de  $g_1$ . Para  $g_1 = 1.1g_1 \text{ mín}$  se observa ligeramente el potencial cuadrático ( $x^2$ ) sobre el cual están superpuestas las oscilaciones; mientras que para  $g_1 = 0.9g_1 \text{ mín}$ , en el potencial no se aprecia una clara superposición de oscilaciones sobre un confinamiento cuadrático.

Sabemos que en los máximos de la temperatura ocurre  $T(x_c) = 1$ , mientras que cuando  $g_1 \approx g_1 \text{ mín}$ , en los mínimos se tiene:  $T(x_c) \approx 0$ , por lo que para valores

## 4.1 Temperatura y potenciales efectivos en el potencial de Zwanzig

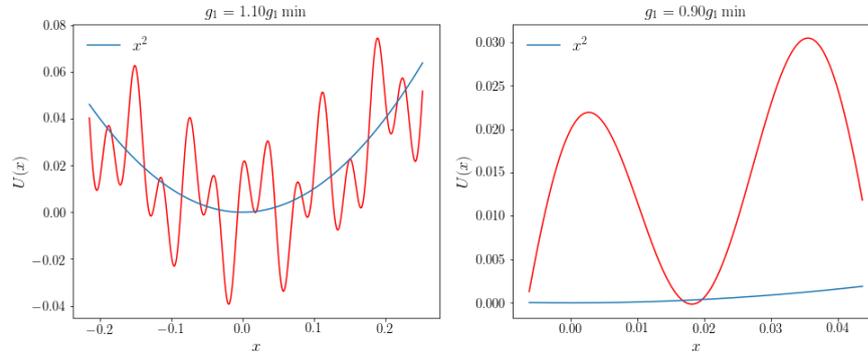


Figura 4.3: Vista del potencial en el intervalo  $(x_{\text{mín}}, x_{\text{máx}})$ , donde la temperatura efectiva es positiva.

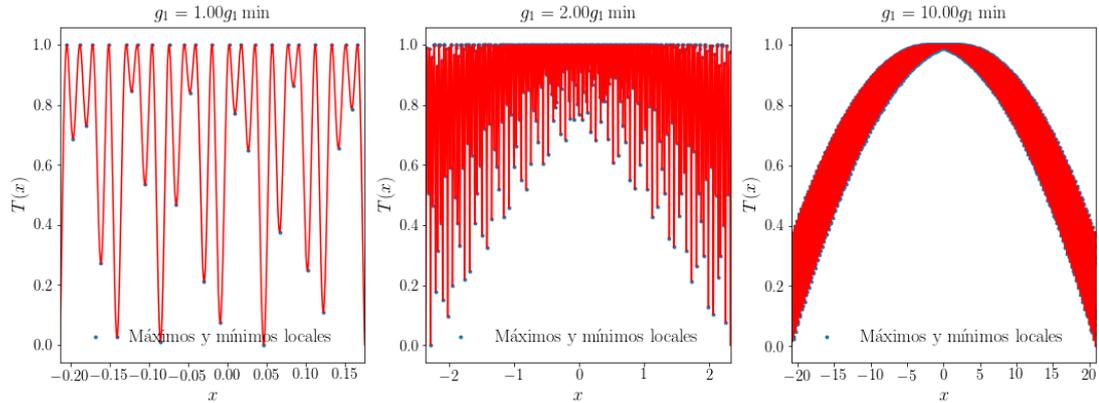


Figura 4.4: Perfiles de temperatura para distintos valores de  $g_1$ . Observamos grandes oscilaciones y dominios pequeños para valores de  $g_1$  comparables con  $g_1$  mín y pequeñas oscilaciones en grandes dominios para  $g_1$  mayores que el valor mínimo.

cercanos a  $g_1$  mín las oscilaciones serán pronunciadas variando en todo el rango de temperaturas permitidas. Dado que  $\sin(z)$  y  $\cos(z)$  son acotados, para valores de  $g_1 \gg g_1$  mín, el dominio de la temperatura crecerá, disminuyendo la contribución de las oscilaciones y a su vez esto se traducirá a recobrar la trampa armónica. En la figura 4.4 mostramos tres gráficas en las cuales se tienen temperaturas efectivas para distintos valores de  $g_1$ .

El potencial efectivo, como superposición del potencial externo y la temperatura efectiva tendrá aún más estructura. Para un valor de  $g_1$  fijo, el efecto de transición de máximo a mínimo del potencial efectivo (y por ende, de mínimo a máximo de la probabilidad) ocurre un mayor número de veces, pues existen tantos valores críticos de  $g_2$  como mínimos del potencial externo.

En la figura 4.5 hemos hallado numéricamente los valores de  $g_2$  para los cuales

#### 4. POTENCIALES CON ESTRUCTURA JERÁRQUICA I: POTENCIAL DE ZWANZIG

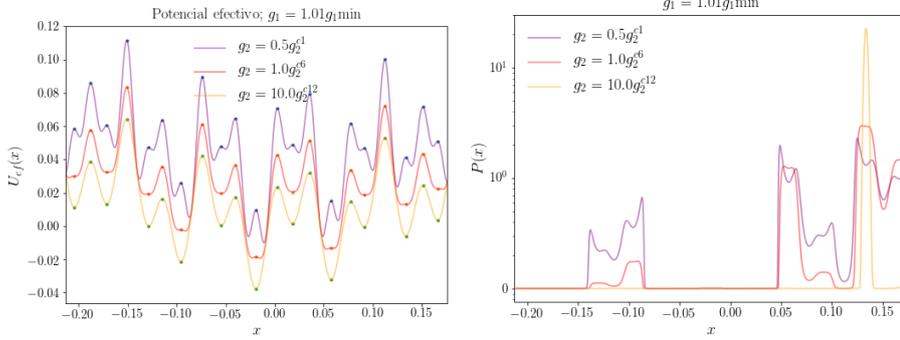


Figura 4.5: Transiciones de máximos a mínimos del potencial efectivo como función de los valores críticos de  $g_2$  y la distribución de probabilidad asociada.

existe cambio de signo en la ecuación  $U''_{\text{ef}}(x_c) = U''(x_c) (1 - 2g_2g_1^2U''(x_c))$  manteniendo  $g_1$  fijo y donde  $x_c$  es un mínimo del potencial externo  $U(x)$ . Elegimos  $g_1 \approx g_1 \text{ mín}$  pues es donde mejor se aprecian dichas transiciones. Los puntos críticos en  $g_2$  están etiquetados en orden ascendente. Para el caso particular de  $g_1 = 1.01g_1 \text{ mín}$ , se tienen 12 valores críticos de  $g_2$ , siendo  $g_2^{c1}$  el menor y  $g_2^{c12}$  el mayor. Los valores de  $g_2$  para los cuales se graficó corresponden a valores por debajo de  $g_2^{c1}$ , y dado que es el mínimo, todos los mínimos del potencial externo son máximos del potencial efectivo; el valor  $g_2^{c6}$ , y un valor mayor a  $g_2^{c12}$ , para el que que todos mínimos del potencial externo son también mínimos del potencial efectivo. Adicionalmente podemos ver que los máximos del potencial externo no sufren un cambio en su naturaleza, sino que se mantienen como máximos en el potencial efectivo sin importar los valores de  $g_2$ .

Dado que  $g_1 \approx g_1 \text{ mín}$ , los efectos de los mínimos locales dominarán más que el término cuadrático en el potencial externo. Esto lo podemos observar en el comportamiento asimétrico de la distribución de probabilidad en la figura 4.5.

Recordemos además, que dada la presencia del potencial armónico, también es de esperar un cambio de geometría del potencial efectivo y de la probabilidad a gran escala, en términos de  $g_2g_1^2$ . Para  $U(x) = x^2/2$  esto ocurre para valores de  $k = g_2g_1^2 = 2$ . Para  $k < 2$  la partícula activa explora las paredes del potencial, teniendo una probabilidad cóncava hacia abajo; para  $k > 2$  el potencial externo se sobrepone a la fuerza termoforética proveniente del nado obteniendo una probabilidad cóncava hacia arriba con un máximo en el centro.

El potencial de Zwanzig no tiene el factor  $1/2$  en el término cuadrático, por lo que el valor de interés es  $k = 4$ . En las gráficas de la figura 4.6 se muestra que para el potencial efectivo, el cambio de concavidad ocurre en la escala global (las oscilaciones locales permanecen) y el cambio es más notorio a medida que crece  $g_1$ . Asimismo presentamos el comportamiento de la función de distribución.

## 4.1 Temperatura y potenciales efectivos en el potencial de Zwanzig

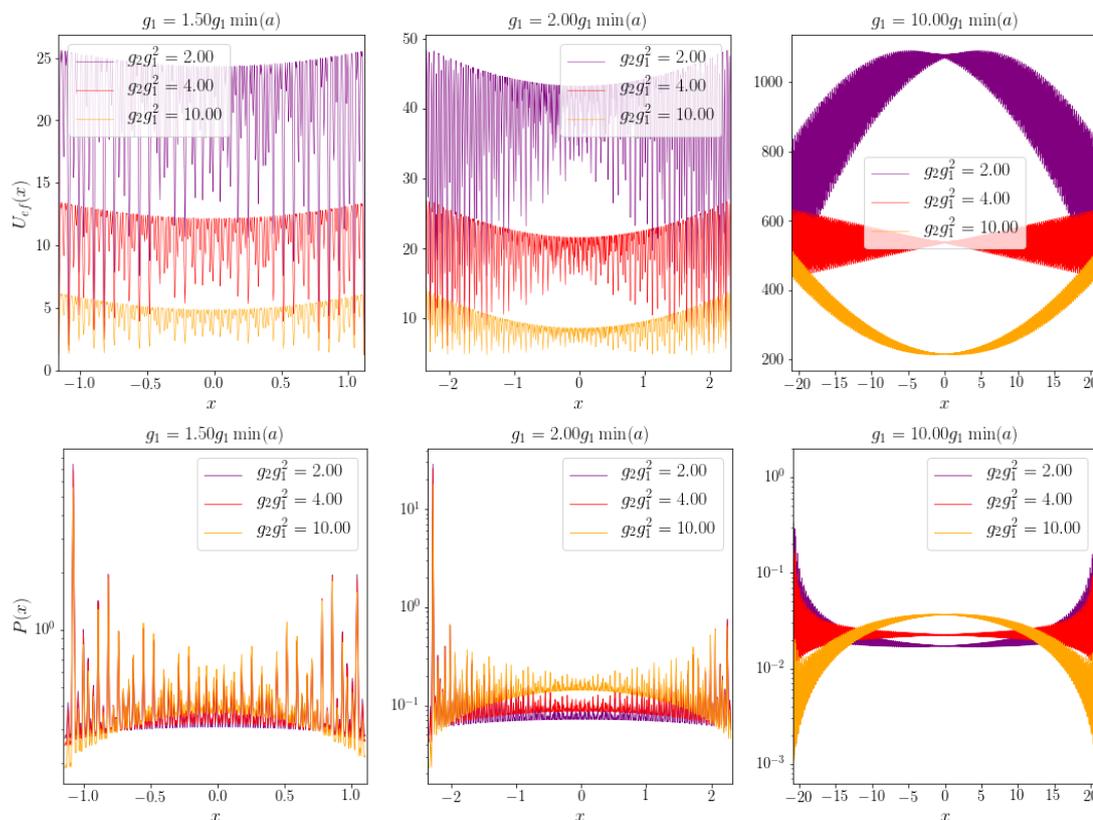


Figura 4.6: Cambio global de la geometría del potencial efectivo como función de  $g_2g_1^2$  y su función de probabilidad asociada.

En las gráficas de la probabilidad, para  $g_1 = 10g_1 \text{ mín}$  se observa la concavidad hacia abajo cuando  $g_2g_1^2 = 10 > 4$ , por lo que a pesar las oscilaciones en  $P(x)$ , el ensamble de partículas se encuentra mayormente en el origen, donde a su vez los efectos de la estructura jerárquica son menores. Para  $g_2g_1^2 = 4$  notamos un aplastamiento local alrededor del origen, similar a la probabilidad homogénea del caso armónico; sin embargo, puede notarse los efectos de la temperatura efectiva en los extremos del dominio pues ésta no es constante y presenta oscilaciones de mayor amplitud en los extremos. Finalmente para  $g_2g_1^2 = 2 < 4$ , el comportamiento global de las partículas consiste en explorar los extremos del dominio.

Adicionalmente, el contraste entre  $g_1 = 1.5g_1 \text{ mín}$  y  $g_1 = 10g_1 \text{ mín}$  nos indica que para un valor de  $g_2g_1^2$  no se mantiene el perfil del potencial efectivo ni el de la probabilidad, como ocurre en el caso puramente armónico.

## 4.2. Difusión y temperatura promedio

Otro aspecto de interés derivado de la subestructura del potencial es el hecho de que para  $g_1$  fijo (lo cual a su vez fija un perfil de temperatura), las oscilaciones de la probabilidad no escalan de manera homogénea con  $g_2$ . Se propone cuantificar los efectos de  $g_1$  y  $g_2$  en la temperatura efectiva y en la distribución de probabilidad simultáneamente mediante la difusión espacial promedio:

$$\langle D(x) \rangle = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} D(x)P(x)dx, \quad (4.8)$$

donde  $x_{\min}$  y  $x_{\max}$  es el intervalo definido por  $g_1$  y  $D(x) \propto T(x)$ . Por lo visto en la ecuación 1.30, este promedio coincide con el promedio de ensamble.

El factor de proporcionalidad entre temperatura y difusión en la relación de Einstein es  $\mu k_B$ . Definiendo la difusión adimensional como  $vLD(x) = D^*(x)$ , donde  $D^*(x)$  tiene dimensiones físicas, obtenemos que el valor de la difusión está dado por  $D(x) = (vL)^{-1}\mu k_B T_0 T(x) = (g_1 g_2)^{-1} T(x)$ . Después de la integración,  $\langle D(x) \rangle$ , este promedio es únicamente función de  $g_1$  y  $g_2$ .

En la figura 4.7 se hace referencia a la difusión de un ensamble de partículas en movimiento Browniano libre (MBL, línea punteada); esto indica la difusión que tendría un ensamble de partículas sin potencial externo, bajo las condiciones de temperatura y movilidad definidas por  $g_1$  y  $g_2$ . Es decir, con difusión exactamente igual a  $D_{\text{MBL}} = (g_1 g_2)^{-1}$ . Notamos que para valores de  $g_1$  fijos (éstos son los que fijan la estructura de la temperatura, y por tanto de la difusión), a medida que  $g_2$  disminuye, (y por tanto,  $(g_2 g_2)^{-1}$ , crece), la difusión promedio no se mantiene constante, sino que disminuye con respecto a la difusión libre lo cual nos indica que el producto  $D(x)P(x)$  tiende a decrecer localmente. Esto cobra sentido si recordamos que existen valores críticos de  $g_2$ ; cuando se está por encima de todos los valores críticos de  $g_2$ , todos los mínimos del potencial externo son máximos de la probabilidad (figura 4.5); a su vez, mínimos del potencial externo siempre son máximos de la temperatura y por tanto de la difusión, teniendo una coincidencia de máximos en el producto  $D(x)P(x)$ . A medida que  $g_2$  disminuye, los puntos críticos de la probabilidad provenientes del potencial externo se vuelven mínimos, resultando en un decremento en la difusión promedio.

Por otra parte, recordemos que con valores de  $g_1$  mayores la temperatura efectiva tiende a un comportamiento parabólico, pues el dominio de la partícula activa crece (figura 4.2) pero la amplitud de las oscilaciones superpuestas en el potencial armónico se mantiene fija. Con  $g_2$  mayores los efectos de la temperatura dentro del potencial efectivo disminuyen monótonamente pues su contribución escala con el inverso de  $g_2$  (ecuación 1.65). Esto se traduce a que la temperatura

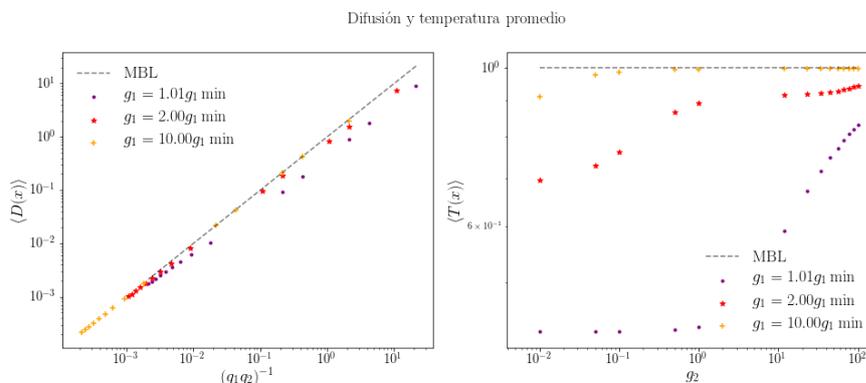


Figura 4.7: Difusión promedio como función de  $g_2$  para distintos valores de  $g_1$ . Escala logarítmica en ambos ejes. Las líneas punteadas en ambas gráficas representan valores de movimiento Browniano libre.

promedio,  $\langle T \rangle$ , es más cercana a 1 (MBL) a medida que  $g_1$  y  $g_2$  crecen; es decir, a medida que el dominio tiende a infinito y los efectos de la temperatura dentro del potencial efectivo tienden a cero.

### 4.2.1. Comparación entre difusión promedio (*run and tumble*) y difusión Browniana (activa y pasiva)

En los capítulos 2 y 3, mediante la ecuación 1.57, hemos establecido una relación directa entre la distribución de probabilidad de una partícula difundiéndose bajo dinámica *run and tumble* y una partícula con movimiento Browniano difundiéndose en un medio de temperatura no homogénea. Para ello, partimos de una difusión efectiva y suponemos válida la relación de Einstein. Observamos la validez de la introducción de temperaturas no homogéneas al observar que partículas *run and tumble* y partículas que siguen movimiento Browniano (en un medio con temperatura efectiva) siguen las mismas distribuciones espaciales. No obstante, cuando se habla de difusión se piensa en una cantidad relacionada con el esparcimiento de una partícula o un ensamble en su medio, tal como se hace notar en la ecuación 1.21

Es natural entonces, comparar los valores  $\langle D \rangle$  (obtenidos únicamente de la capacidad de nado y tasas de cambio de dirección) con la difusión que presenta un ensamble de partículas con movimiento Browniano con y sin temperatura efectiva. Distinguiremos estas tres difusiones como difusión *run and tumble*, difusión activa y difusión pasiva.

Dado que que el movimiento *run and tumble* se encuentra acotado (donde

#### 4. POTENCIALES CON ESTRUCTURA JERÁRQUICA I: POTENCIAL DE ZWANZIG

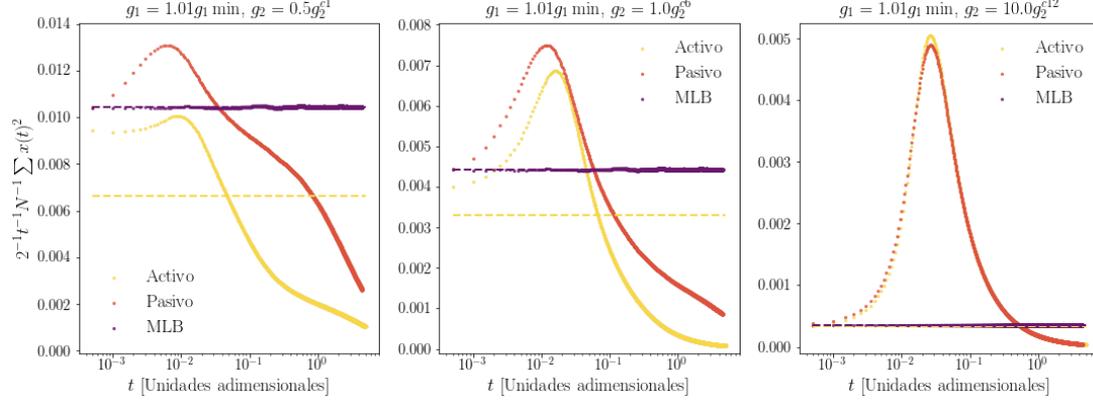


Figura 4.8: Difusión activa y pasiva de un ensemble Browniano. La línea punteada púrpura indica el valor de  $(g_1g_2)^{-1}$  y la línea punteada amarilla,  $\langle D \rangle$ .

la velocidad de nado iguala a la fuerza externa en magnitud), para el desplazamiento cuadrático medio se cumple  $\langle x^2(t) \rangle < c = \max\{x_{\min}^2, x_{\max}^2\}$ , y por tanto,  $2^{-1}t^{-1}\langle x^2(t) \rangle \rightarrow 0$ . Por lo que no podemos extender la definición de la difusión efectiva a la dada por la ecuación 1.21. Lo mismo ocurre para la difusión activa, pues la temperatura efectiva establece fronteras idénticas (donde la temperatura efectiva es igual a cero), resultando en difusión nula para tiempos grandes. Finalmente, para la difusión pasiva, el promedio  $\langle x^2 \rangle$  puede calcularse como el valor esperado de  $x^2$  empleando la distribución de Boltzmann, lo cual da un valor independiente del tiempo, traduciéndose nuevamente en difusión nula.

El caso de la difusión libre representa a un sistema meramente idealizado, pues en la práctica, las partículas difusivas siempre se encuentran confinadas por paredes rígidas o constricciones energéticas, lo cual no impide estudiar la difusión a tiempos tales que los efectos del confinamiento sean despreciables.

En la gráfica 4.8 comparamos la difusión activa y pasiva de un ensemble de  $2 \times 10^5$  partículas con movimiento Browniano en  $1 \times 10^4$  pasos de tiempo con  $\Delta t = 5 \times 10^{-4}$ . Nuestro punto de comparación es el ensemble Browniano libre (puntos morado) cuya difusión obtenida numéricamente coincide con el valor esperado  $D_{\text{MBL}} = (g_1g_2)^{-1}$  (línea punteada morada). Observando la geometría de las curvas notamos que tanto difusión pasiva como activa tienden a cero con el tiempo sin presentar un comportamiento constante en ningún intervalo de tiempo. Además, notamos que el valor de la difusión promedio (línea punteada amarilla) se encuentra cercano al valor de la difusión donde la curva cambia de concavidad, valor que se acerca a  $D_{\text{MBL}}$  a medida que  $g_2$  aumenta.

Por otra parte, retomando el argumento hecho en la subsección anterior sobre el aumento de la difusión promedio a través de los valores críticos de  $g_2$  se hicieron simulaciones con  $g_2 \in \{0.5g_2^{c1}, g_2^{c6}, 10g_2^{c12}\}$ . Notamos que cuando todos máximos

(provenientes de mínimos del potencial externo) de la difusión efectiva coinciden con mínimos de la probabilidad ( $g_2 < g_2^{c1}$ ) la difusión activa se encuentra siempre por debajo de la difusión pasiva y cuando por el contrario, los máximos de la difusión efectiva son máximos de la probabilidad ( $g_2 > g_2^{c12}$ ) se observa que la máxima difusión activa es mayor que la máxima difusión pasiva. Finalmente, el hecho de que se tenga a tiempos pequeños más difusión que en el caso libre se debe a que para  $g_1 \approx g_1$  mín los efectos de la rugosidad del potencial son más notorios y dado que en el origen ( $x = 0$ , condición inicial para todo el ensamble) existe un máximo local en el potencial, se tiene el efecto de alejar al ensamble del origen más rápidamente de lo que ocurre para un ensamble libre de potencial.



## Potenciales con estructura jerárquica II: Fuerza tipo Weierstrass

---

En el capítulo anterior observamos que los efectos de la rugosidad en un potencial varían de acuerdo con la escala de exploración (velocidad y longitud de persistencia contra temperatura y constricción energética), presentando efectos locales a medida que la constricción energética es mayor que la energía cinética de las partículas. Un ejemplo de esto es la asimetría de la distribución de probabilidad en la figura 4.5. Vale la pena preguntarse qué ocurre cuando a pesar de disminuir los parámetros de nado ( $g_1$ ) y aumentar el parámetro de atrapamiento ( $g_2$ ), aún se tiene tanta subestructura (oscilaciones dentro de oscilaciones), como en el caso de  $g_1$  grandes.

A primera aproximación, esperamos perfiles de temperatura, potencial efectivo y probabilidades similares a aquellos observados para el potencial de Zwanzig. Adicionalmente queremos indagar si la presencia de subestructura de tendencia fractal (estructura autosimilar como se observa en la figura 5.2) afecta a las cantidades globales (promediadas en el espacio) como función de  $g_1$  y  $g_2$ , y finalmente medir la separación de las cantidades estadísticas del *run and tumble* y el movimiento Browniano para los distintos potenciales estudiados en función de sus geometrías, tal como ocurrió al calcular las difusiones promedio.

Definiremos nuestro potencial jerárquico, nuevamente como un potencial armónico más una perturbación periódica  $Z$  de amplitud  $\zeta a$ :

$$\begin{aligned} U(x) &= \frac{1}{2}x^2 + aZ_p(x) \\ Z_p(x) &= -\frac{1}{\pi} \sum_{n=0}^p \left(\frac{\alpha}{\beta}\right)^n \cos(\beta^n \pi x). \end{aligned} \tag{5.1}$$

## 5. POTENCIALES CON ESTRUCTURA JERÁRQUICA II: FUERZA TIPO WEIERSTRASS

---

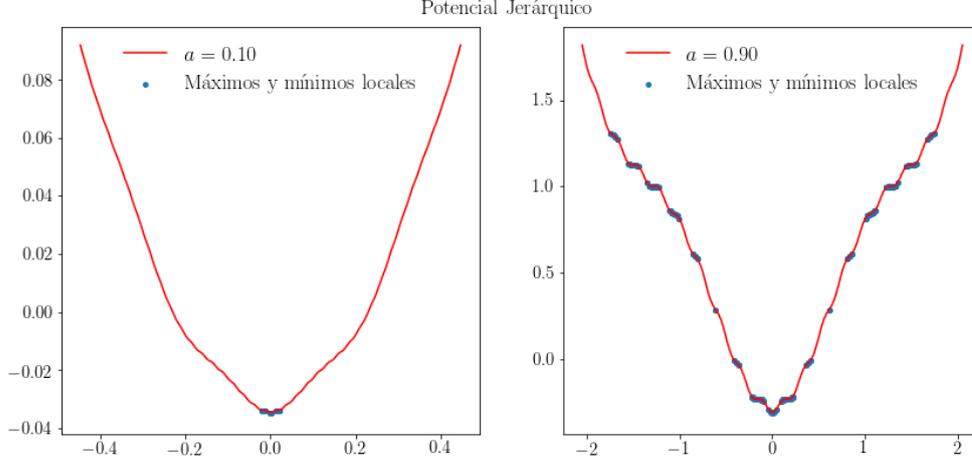


Figura 5.1: Potencial con estructura jerárquica,  $p = 3$ ,  $\alpha = 0.75$  y  $\beta = 9$ .

El valor de  $\zeta$  está relacionado con la serie geométrica,  $\zeta = \pi^{-1} \sum_0^p (\alpha\beta^{-1})^n$ . Para  $p < \infty$  siempre es posible acotar las oscilaciones de  $Z_p$  por  $\pi^{-1}[1 - (\alpha\beta^{-1})^{p+1}](1 - \alpha\beta^{-1})^{-1}$ , lo cual corresponde al valor de una suma geométrica con  $p$  términos.

El potencial está definido de esta manera pues es de interés que las amplitudes de las oscilaciones de la temperatura, relacionadas con las oscilaciones en la fuerza externa, estén acotadas independientemente del número  $p$  de términos:

$$\begin{aligned}
 U'(x) &= x + aW_p(x) \\
 W_p(x) &= Z'_p(x) = \sum_{n=0}^p \alpha^n \sin(\beta^n \pi x).
 \end{aligned}
 \tag{5.2}$$

Cuando  $p \rightarrow \infty$  y se cumple  $\alpha\beta > 1 + 3\pi/2$  no sólo las oscilaciones están acotadas, sino que además  $W_p(x)$  converge uniformemente a una función continua  $W(x)$  llamada función de Weierstrass (41). Es por ello que llamamos al potencial jerárquico y a la fuerza, “de Weierstrass”, dado que es la derivada del potencial la que posee superpuesta, en el límite, a la función de Weierstrass como perturbación. Una de las propiedades de la función de Weierstrass es continuidad en todo punto del dominio pero no diferenciabilidad en ninguno. Además, la gráfica de la función de Weierstrass es una curva de dimensión fractal superior a 1, por lo que en el límite de  $p \rightarrow \infty$  se garantiza tener siempre subestructura.

En la gráfica 5.2 se muestra el perfil jerárquico de la función de Weierstrass truncada en  $p = 15$  términos en la serie. Para efectos de ilustración usamos los parámetros,  $\alpha = 0.45$  y  $\beta = 13$ ; sin embargo, en lo subsecuente emplearemos

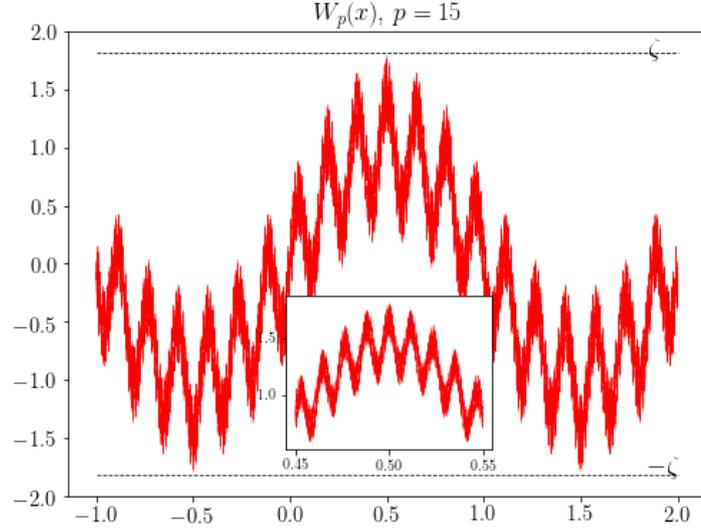


Figura 5.2: Función de Weierstrass truncada con  $p = 15$ ,  $\alpha = 0.45$ ,  $\beta = 13$ .

valores de  $p = 3$ ,  $\alpha = 0.75$  y  $\beta = 9$ .

Definido el potencial, nos interesa hallar la dependencia del dominio con  $g_1$  tal como lo hicimos para el potencial de Zwanzig. En la figura 5.3 observamos el crecimiento lineal de los valores máximos y mínimos de  $x$  como función de  $g_1$ .

Los límites fueron hallados numéricamente como  $x_{\text{máx}/\text{mín}} = \text{mín} / \text{máx}\{x | U'(x) = \pm g_1\}$ , para  $g_1$  fijo. A diferencia del potencial de Zwanzig, los límites inferiores y superiores son próximos a  $\pm g_1$ .

De manera análoga, hallamos el valor mínimo de  $g_1$  por debajo del cual, debido a la restricción del dominio marcado por  $g_1$  no se explora la estructura completa del potencial externo; aunque a diferencia del potencial de Zwanzig, la temperatura efectiva no presenta un cambio importante en su comportamiento. Al graficar la temperatura efectiva para distintos valores de  $a$  y  $g_1$  (figura 5.4) observamos nuevamente la tendencia de  $T(x) \rightarrow 1 - U'(x)^2 g_1^{-2}$  a medida que  $g_1$  aumenta, siendo más rápida para  $a$  menores. Dado que las oscilaciones en la temperatura efectiva están mejor acotadas (mientras más alta la frecuencia, menor amplitud), observamos que incluso para valores cercanos a  $g_1$  mín, no se tiene el comportamiento de barreras consecutivas con amplitudes cercanas a 0 y 1, como en el potencial de Zwanzig.

A pesar de que existe más subestructura, aún se tiene la transición de mínimos a máximos dada por los valores críticos de  $g_2$ . En la figura 5.5 hemos graficado el potencial efectivo para  $a = 0.9$  y  $g_1 = 1.01 g_1$  mín. Con estos valores obtenemos 68 mínimos locales en el potencial externo y por tanto, 68 valores críticos de  $g_2$  ( $g_2^{ci}$ ). Podemos observar que para el valor  $g_2 = 0.5 g_2^{ci}$  (todos los mínimos del potencial

## 5. POTENCIALES CON ESTRUCTURA JERÁRQUICA II: FUERZA TIPO WEIERSTRASS

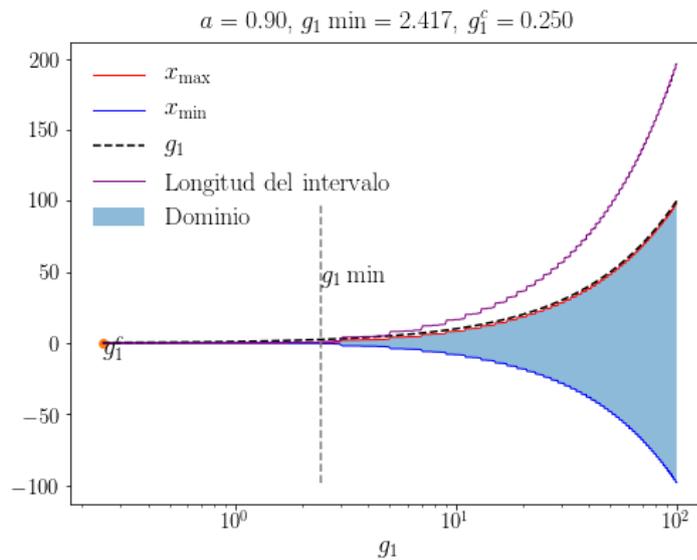


Figura 5.3: Valores máximos y mínimos de  $x$  como función de  $g_1$  (escala logarítmica en el eje  $g_1$ ) para el potencial jerárquico.

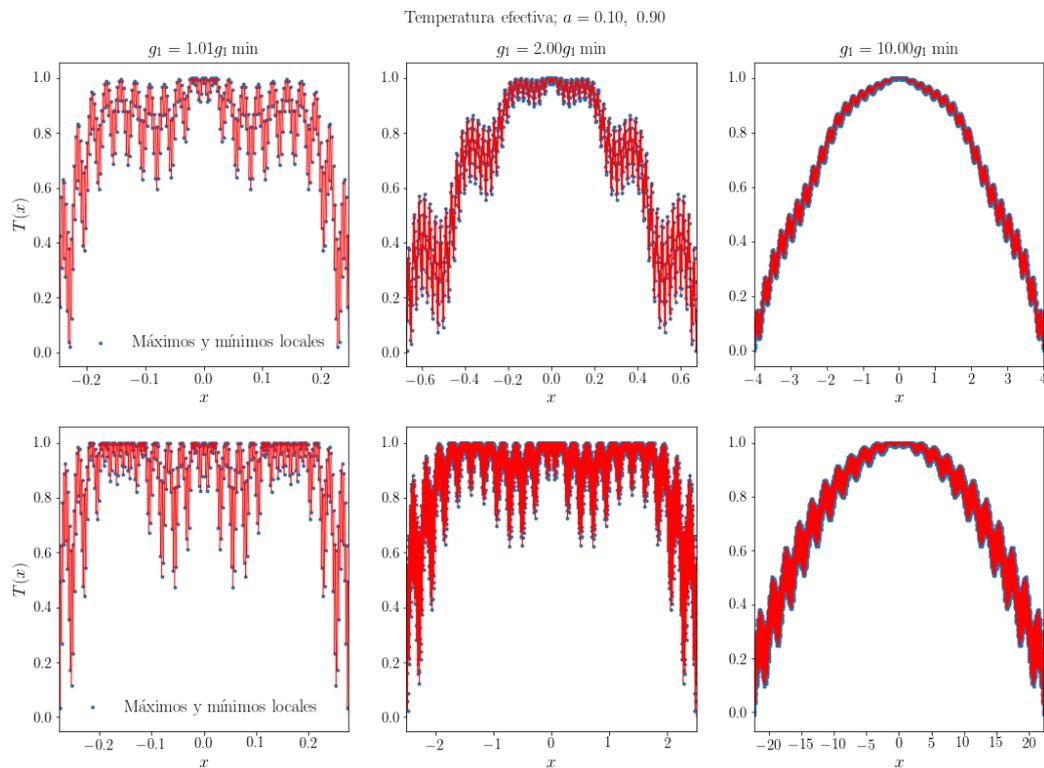


Figura 5.4: Perfiles de temperatura para  $a = 0.1$  (panel superior), y  $a = 0.9$  (panel inferior).

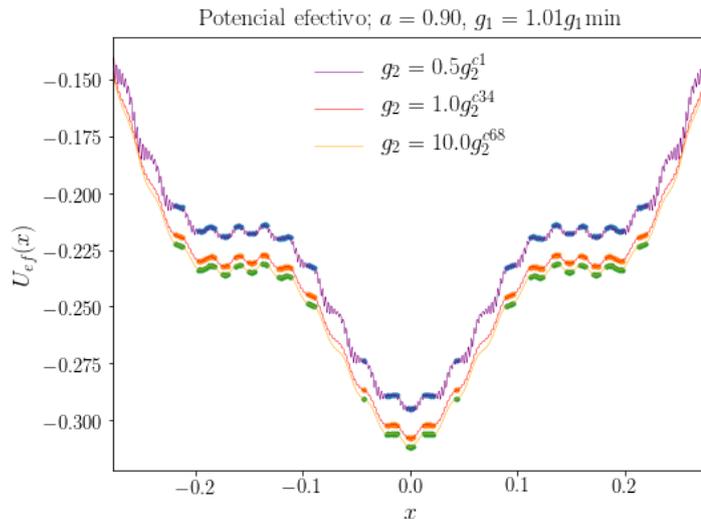


Figura 5.5: Perfil del potencial efectivo para distintos valores de  $g_2$ . Para  $g_2 < g_2^{c1}$  todos los mínimos del potencial externo son máximos locales del potencial efectivo. Para  $g_2 > g_2^{c68}$ , los mínimos del potencial externo y potencial efectivo coinciden.

externo son máximos del potencial efectivo), pese a que existe un máximo local en  $U_{\text{ef}}(x)$  en  $x = 0$ , un ensamble de partículas tenderá a acumularse en una vecindad del origen, como se observa en la gráfica de la distribución de probabilidad. Para  $g_2 = 10g_2^{c68}$ , (todos los mínimos locales del potencial externo se han traducido a mínimos del potencial efectivo) la vecindad se reduce y existe un cambio de orden de magnitud entre la probabilidad de hallarse en una vecindad del origen y el resto del intervalo para  $g_2 = 0.5g_2^{c1}$  y  $g_2 = g_2^{c68}$  (figura 5.6). Adicionalmente, mostramos la distribución de probabilidad obtenida a partir de la integración de la ecuación de Langevin para un ensamble de partículas.

Dado que este potencial jerárquico también es armónico a gran escala, nos interesa observar los cambios de concavidad en el potencial efectivo y en la probabilidad. Como en el caso puramente armónico, esto ocurre alrededor de  $g_2g_1^2 = 2$ . En las siguientes gráficas de la figura (5.7) observamos el cambio de concavidad en  $U_{\text{ef}}$ , variando la amplitud  $a$  para distintos valores de  $g_1$  y  $g_2$ , tales que  $g_2g_1^2 = 1, 2, 10$ . Como ocurrió para el potencial de Zwanzig, estos cambios son más claros conforme  $g_1$  aumenta. Es importante notar que la transición de  $g_2$  (con  $g_1^2$  fijo), alrededor del 2 no es simétrica, pues las oscilaciones en la temperatura decrecen monótonamente con  $g_2$ , recuperando principalmente el comportamiento cuadrático de la temperatura.

En los perfiles de las probabilidades (5.8) notamos que el atrapamiento para valores de  $g_1 \approx g_1 \text{ mín}$  y  $g_2g_1^2 = 1$  tiene fuertes efectos en las fronteras del dominio provocando hasta un orden de magnitud de diferencia entre la probabilidad de

## 5. POTENCIALES CON ESTRUCTURA JERÁRQUICA II: FUERZA TIPO WEIERSTRASS

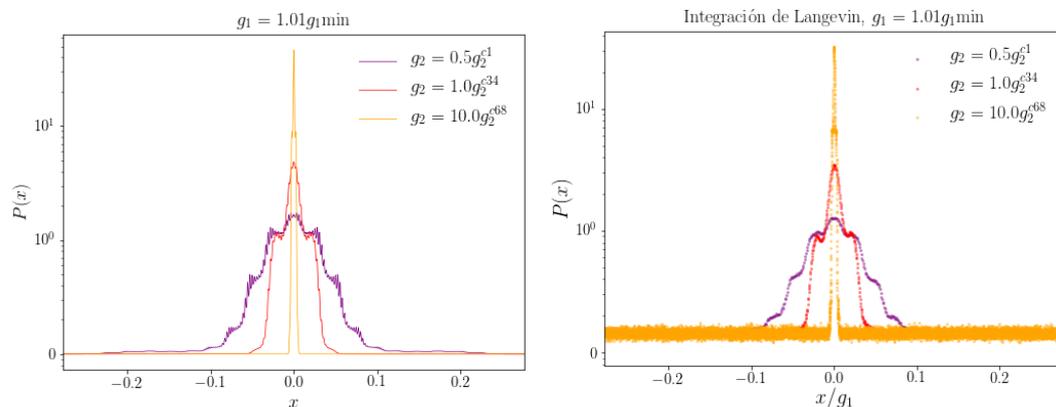


Figura 5.6: Distribución de probabilidad teórica (izquierda) y distribución de probabilidad a partir de integración de la ecuación de Langevin (derecha) en escala logarítmica en  $P(x)$ .

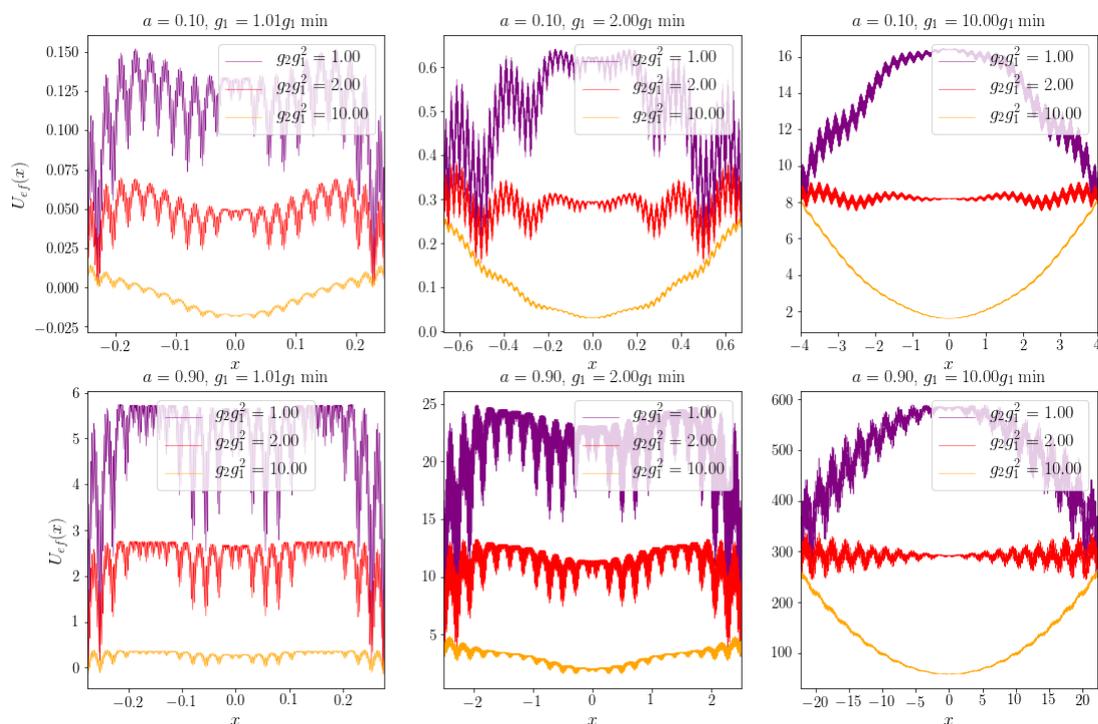


Figura 5.7: Perfiles del potencial efectivo para  $a = 0.1$  (panel superior) y  $a = 0.9$  (panel inferior) para mismos valores de  $g_1$  que en la figura 5.4.

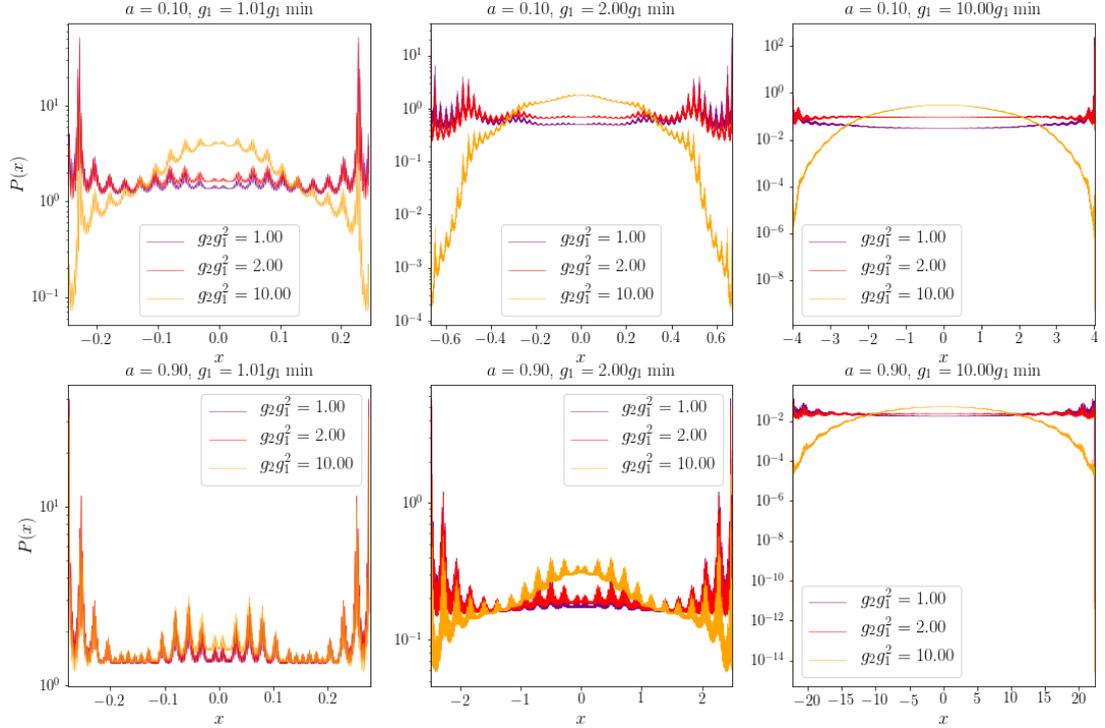


Figura 5.8: Perfiles de las funciones de distribución para  $a = 0.1$  (panel superior) y  $a = 0.9$  (panel inferior) para mismos valores de  $g_1$  que en la figura 5.7

hallarse en una vecindad de los extremos del dominio y en el resto del intervalo. En contraste, a medida que  $g_1$  crece, la probabilidad de explorar las fronteras disminuye (de manera menos abrupta que para  $g_1 \approx g_1$  mín) apareciendo un máximo global alrededor del origen. A su vez, la estructura global de la probabilidad es más notoria que la subestructura proveniente de las oscilaciones.

Empleando la definición 4.8 calculamos la difusión y temperatura promedio para el caso el potencial de estructura jerárquica. En la figura 5.9 observamos que la difusión se aleja del caso Browniano a medida que el producto  $(g_1 g_2)^{-1}$  aumenta de manera similar que para el potencial de Zwanzig.

Por otra parte, la separación de la temperatura efectiva con respecto al movimiento Browniano difiere del caso de Zwanzig. En el potencial de Zwanzig, las curvas para cada valor de  $g_1$  crecen uniformemente. Es decir, para  $g_1^{(i)} > g_1^{(j)}$ , cada punto de de la temperatura efectiva satisface  $\langle T(x) \rangle^{(i)} > \langle T(x) \rangle^{(j)}$ . Recordemos que  $g_1 \gg g_1$  mín implica un intervalo de  $x$  mayor, donde a medida que  $g_2$  crece, la estructura local del potencial es menos relevante y a medida que disminuye, el ensamble de partículas *run and tumble* exploran más los máximos y mínimos locales. En este caso,  $g_1 \gg g_1$  mín también implica un mayor dominio, pero a

## 5. POTENCIALES CON ESTRUCTURA JERÁRQUICA II: FUERZA TIPO WEIERSTRASS

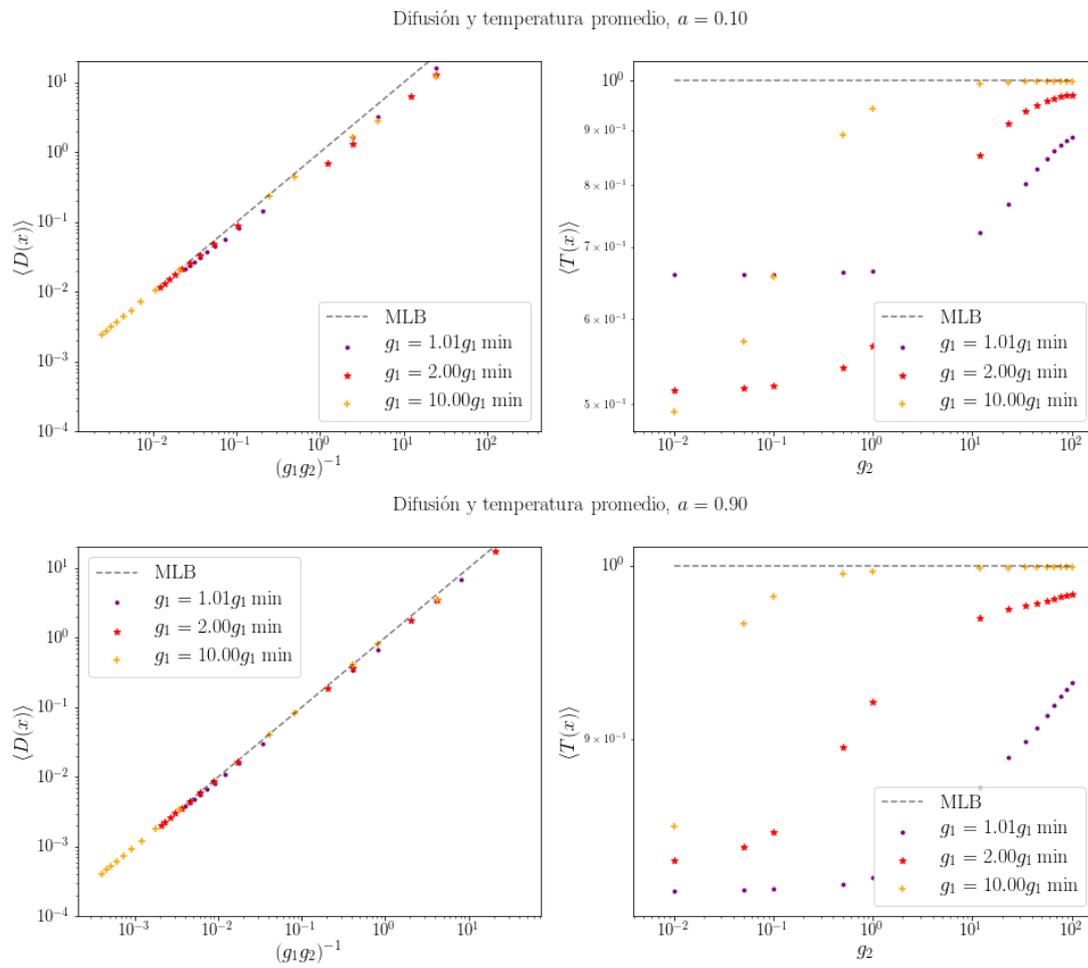


Figura 5.9: Difusión promedio y temperatura efectiva promedio dependientes de  $g_1$  y  $g_2$  para distintas amplitudes  $a$ .

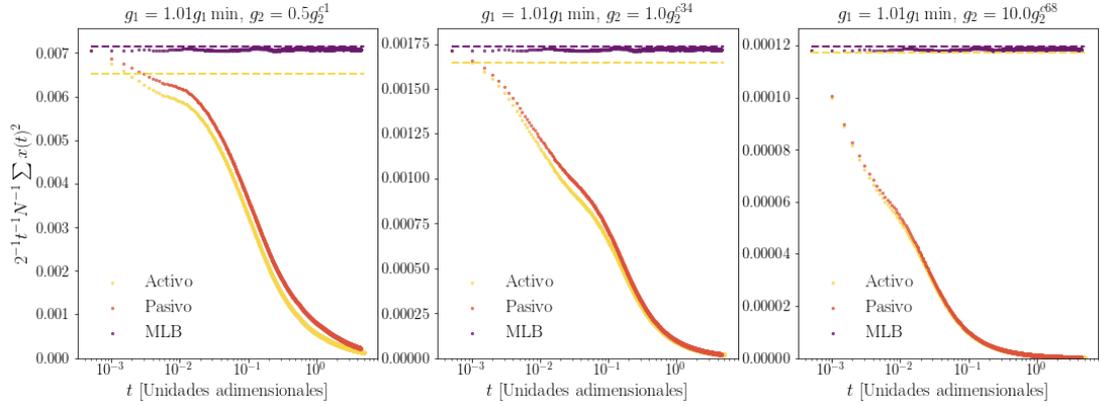


Figura 5.10: Difusión activa y pasiva de un ensemble Browniano. La línea puntada púrpura indica el valor de  $(g_1 g_2)^{-1}$  y la línea punteada amarilla,  $\langle D \rangle$ .

medida que  $g_2$  disminuye se halla más subestructura que en el caso de Zwanzig, la cual a su vez aumenta con  $g_1$ , por lo que existe una disminución más drástica de la temperatura promedio para valores de  $g_2$  pequeños a medida que  $g_1$  aumenta. Adicionalmente, notamos que para valores pequeños de difusión libre, la difusión pasiva es menor que la activa, siendo similares a medida que la difusión libre aumenta.

En cuanto a la difusión de un ensemble Browniano (activo, pasivo y libre bajo mismas condiciones que en el capítulo 4), observamos un comportamiento cualitativo similar a la difusión para el potencial de Zwanzig; sin embargo, dado que para este nuevo potencial, el origen  $x = 0$  si es un mínimo del potencial externo, no observamos para ningún valor de  $g_2$  que el valor de la difusión activa sea mayor que la difusión libre, sino por el contrario, éste decrece monótonamente en el tiempo. Igualmente notamos que para  $g_2 < g_2^{c1}$  la difusión activa está acotada por la difusión pasiva, tomando valores más cercanos (para cada tiempo) a medida que  $g_2$  aumenta. Por último, pese a que el valor de la difusión promedio  $\langle D \rangle$  se acerca a  $D_{\text{MBL}}$  a medida que  $(g_2 g_1)^{-1}$  crece, la relación entre  $\langle D \rangle$  y el valor  $(2tN)^{-1} \sum x(t)^2$  es menos clara en este caso, lo cual favorece una disociación de ambas interpretaciones.

## 5.1. Difusión promedio en función de la rugosidad

Finalmente, ahora que hemos explicado los efectos de oscilaciones dentro de una misma estructura del potencial, surge la necesidad de contrastar cómo difieren estos efectos en los potenciales antes estudiados y que no identificamos como potenciales rugosos. Para ello definimos nuestra medida de rugosidad:

$$r + 1 = \frac{1}{\sqrt{I^2 + R^2}} \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \sqrt{1 + U'(x)^2} dx, \quad (5.3)$$

donde  $I = x_{\max} - x_{\min}$  es la longitud del intervalo y  $R = \max U(x) - \min U(x)$ , es el rango del potencial externo dentro del intervalo. Definido de esta manera, cualquier recta ( $U(x) = mx + b$ ) en un intervalo finito tiene un valor  $r = 0$ . Para un potencial  $U'(x) \neq 0$  en un subintervalo del dominio de medida distinta de cero,  $r > 0$ . Por ejemplo, el potencial armónico, integrado en  $(-1, 1)$ , tiene un valor de rugosidad  $r = 0.1135$  mientras que el potencial de Zwanzig con  $g_1 = 1.01g_1 \text{ mín}$ ,  $r = 5.428$ .

Empleamos el potencial externo y no el potencial efectivo para hacer explícita la dependencia de la difusión promedio con los parámetros  $g_1$  y  $g_2$ . Recordamos que para el potencial armónico sin rugosidades, al emplear la variable  $y = x/g_1$ , el dominio de  $y$  se mantiene constante, de -1 a 1. Para comparar los demás potenciales sin introducir el factor de dominio (los dominios de los potenciales de Zwanzig y Weierstrass escalan proporcionales a  $g_1$ ), en la gráfica 5.11 hicimos el mismo cambio de variable  $y = x/g_1$  para cada potencial.

Notamos que la difusión promedio depende monótonamente, de los valores de  $g_2g_1^2$ , es decir, un decremento en  $g_2g_1^2$  siempre está ligado a un aumento en la difusión promedio para un valor de rugosidad fijo. El potencial de Zwanzig es el que tiene más rugosidad con respecto al resto de los potenciales, y el potencial jerárquico (fuerza de Weierstrass) el que logra tener la menor rugosidad (cuando  $a = 0.1$ ), esto se debe a que el potencial jerárquico no es el que presenta las oscilaciones tipo Weierstrass, sino su derivada, lo cual implica que en general, éste sea más liso que el potencial de Zwanzig.

Observamos también, que la difusión promedio tiene un máximo global cercano a  $r = 1$ , para los potenciales que alcanzan dicho valor de rugosidad (esto excluye al oscilador armónico). Esto nos indica que la rugosidad, por debajo de un valor crítico aumenta la difusión. Recordemos que cada mínimo en el potencial externo contribuye a máximos en la temperatura, traducándose a mayor fuerza termofóretica y mayor difusión. Sin embargo, para valores de  $r > 1$ , la difusión

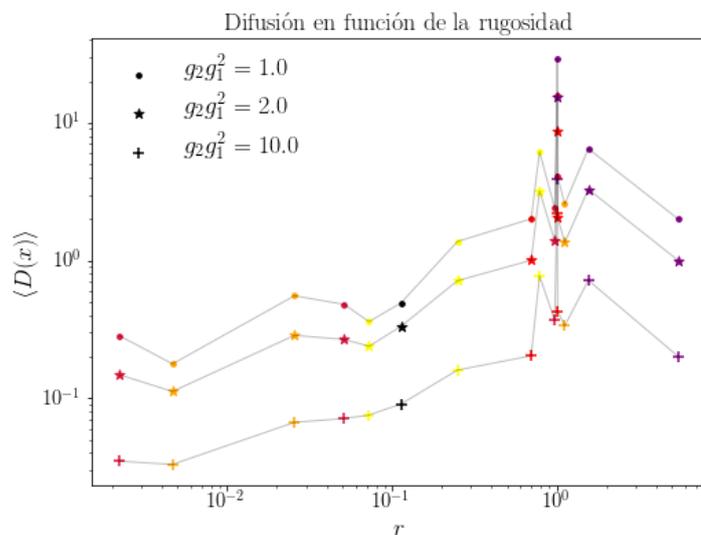


Figura 5.11: Código de color: **Negro**: Potencial armónico, **Anaranjado**: Doble pozo asimétrico,  $a = 0.1$ , **Amarillo**: Doble pozo asimétrico,  $a = 0.9$ , **Morado**: Potencial de Zwanzig, **Escarlata**: Potencial de Weierstrass,  $a = 0.1$ , **Rojo**: Potencial de Weierstrass,  $a = 0.9$ .

debido a la fuerza termoforética no se sobrepone al efecto del atrapamiento. No obstante, recordemos que esta cantidad,  $\langle D \rangle$ , no guarda relación con una medida de esparcimiento (ecuación 1.21), sino como medida de velocidad local (ecuación 1.45), pues en la dinámica *run and tumble*, el desplazamiento cuadrático medio escalado con el tiempo siempre tiende a cero independientemente de la rugosidad.



## Conclusiones

---

El objetivo de esta tesis fue observar los efectos de la rugosidad en una constricción energética externa (a través del potencial) sobre una partícula autopropulsada. Esto nos llevó a emplear el modelo *run and tumble*, para describir las propiedades estadísticas de ensambles de partículas sin interacción entre ellas a bajos números de Reynolds, en términos de lo que en la tesis llamamos parámetros de nado,  $g_1 = vL/(\mu\epsilon)$  y  $g_2 = \epsilon/(k_B T_0)$ .

Desde el potencial armónico simple, notamos que  $g_1$ , se encuentra directamente relacionado con la longitud máxima de nado de una partícula autopropulsada. Dicha longitud máxima se explica como los puntos de equilibrio entre la fuerza termoforética, proveniente de la actividad y la fuerza derivada del potencial externo. Dado que nos encontramos en el límite sobreamortiguado, la ausencia de fuerza neta externa, es decir, la ausencia de efectos inerciales, se traduce en velocidades nulas en las posiciones máxima y mínima del dominio.

Por otra parte, así como  $g_1$  se relaciona con el dominio, fijado este valor,  $g_2$  marca cambios en la estructura global y local del potencial efectivo y en la probabilidad. En el capítulo 1, un análisis de las derivadas del potencial efectivo, nos mostró que 1) todos los puntos mínimos del potencial externo son puntos críticos (máximos, mínimos o de inflexión) del potencial efectivo y 2) la naturaleza de estos últimos depende del valor de  $g_2$ . Matemáticamente, la naturaleza de los puntos críticos depende del valor (positivo, negativo o nulo) de la ecuación  $U''_{\text{ef}}(x_c) = U''(x_c) (1 - 2g_2^{-1}g_1^{-2}U''(x_c))$ , donde  $x_c$  es un punto mínimo del potencial externo. Fijándonos en un valor particular de  $U''(x_c)$ , para  $g_2 \gg U''(x_c)$ , se tiene que  $U''_{\text{ef}}(x_c) \approx U''(x_c)$ , por lo que  $x_c$  también es mínimo del potencial efectivo. Sin embargo, a medida que  $g_2$  disminuye, observamos una transición en la estabilidad de dicho punto. De aquí concluimos que existen tantos valores críticos de  $g_2$  como mínimos del potencial externo. Físicamente esto se traduce en estabilidad de dichos puntos en función de la razón de energía térmica  $k_B T_0$  y atrapamiento  $\epsilon$ . A grandes valores de  $g_2$  (comparados con  $U''(x_c)$ ), la energía de atrapamiento

## 6. CONCLUSIONES

---

es mayor que la energía térmica proveniente del nado, por lo que los mínimos del potencial externo continúan siendo mínimos del potencial efectivo. Mientras que para pequeños valores de  $g_2$ , se tiene una mayor contribución de la fuerza termoforética, alejando a las partículas de los mínimos locales, convirtiéndolos en máximos del potencial efectivo, y por consiguiente, mínimos de la probabilidad.

Adicionalmente, observamos que el número de puntos críticos del potencial efectivo y de la probabilidad, dentro del dominio, es independiente de los parámetros de nado; sin embargo, sabemos que para potenciales tipo armónicos (lisos y rugosos), influyen en la tendencia de acumulación en la región central del dominio (concavidad hacia abajo en la probabilidad), o de explorar las fronteras del confinamiento (concavidad hacia arriba), pudiendo concluir que sí afectan al comportamiento global. Es decir, tendencia a tener un máximo de probabilidad en la zona central del dominio, o dos, en las fronteras (tendencia de bifurcación). Este comportamiento se observa en partículas activas en dos dimensiones, donde, independientemente de la forma del confinamiento, existen los regímenes de confinamiento en el centro o en las fronteras (36, 42).

Retomando lo mencionado en las primeras líneas, con el propósito de cuantificar las palabras “efecto” y “rugosidad” se hizo uso del valor promedio de la difusión (ecuación 4.8) y la presentamos en función de los parámetros de nado y de una medida *ad hoc* de rugosidad. Aquí vale la pena un recordatorio, durante la introducción de esta tesis, la palabra promedio implicó promedio de ensamble tomado sobre un conjunto de partículas, mientras que en los capítulos 4 y 5 empleamos el promedio espacial, donde se integran los valores de la difusión en  $x$ , por la probabilidad de ocupar dicho punto, sin embargo, como vimos al introducir por primera vez la probabilidad  $P(x)$  en la ecuación 1.30, estos dos puntos de vista son equivalentes. Hecha la aclaración, concluimos que el promedio espacial de la difusión sigue un comportamiento acotado por arriba, por una partícula activa en difusión libre. Por acotamiento superior, nos referimos a valores mayores de la difusión promedio en los casos límites mencionados; y por condiciones inhomogéneas, al perfil de temperatura efectiva, dependiente de la coordenada espacial. Los límites están dados en el siguiente esquema: cuando  $(g_2g_1)^{-1}$  disminuye, la difusión tiende a la difusión promedio de partícula activa libre de potencial externo. Mientras que para valores de  $(g_2g_1)^{-1}$  mayores, la difusión esperada disminuye.

Cuando comparamos la dependencia de la difusión promedio con la rugosidad ( $r$ ), observamos la aparición de un pico de difusión alrededor de  $r = 1$ , siendo mayor con valores de  $g_2g_1^2$  bajos. Observamos que la rugosidad no disminuye monótonamente a la difusión espacial promedio, sino que sigue un comportamiento creciente hasta el valor umbral de  $r$ , a partir del cual disminuye nuevamente. No obstante, gracias a lo observado en el desplazamiento cuadrático medio obtenido de la integración de Langevin para ensambles de partículas con movimiento

---

Browniano activo y pasivo, sabemos que el valor de la difusión promedio,  $\langle D \rangle$  no es una cantidad representativa del valor de  $t^{-1} \langle x^2(t) \rangle$ , pues en el límite de tiempos grandes, esta última decae a cero; por lo que solo conservamos la interpretación de  $D(x)$  como la difusión inhomogénea necesaria para que una partícula en el régimen Browniano (mediante la ecuación de Langevin) siga la misma distribución de probabilidad espacial que una partícula *run and tumble*, en el régimen estacionario.

En lo que respecta a la física estadística de la dinámica *run and tumble* y del movimiento Browniano sobreamortiguado podemos decir lo siguiente. Equilibrio térmico no implica equilibrio termodinámico uniforme. Prueba de esto es el caso de la difusión Browniana libre, donde pesar de tener temperaturas iguales entre el medio y el ensamble Browniano (se supone en el principio de equipartición de la energía), no se alcanza equilibrio mecánico pues el desplazamiento cuadrático medio diverge en el tiempo. Por otra parte, constricciones energéticas estáticas sí pueden llevar a un equilibrio termodinámico. Esto se refleja en la existencia del factor de Boltzmann en la distribución de probabilidad espacial de un ensamble de partículas en el régimen Browniano bajo un potencial externo y a su vez en la difusión nula del mismo. En el caso del *run and tumble*, se pierde nuevamente el equilibrio termodinámico, observándose en la no existencia de un análogo del factor de Boltzmann y en que el promedio de ensamble para la difusión no coincide con el promedio temporal de la misma (falta de ergodicidad en sistemas fuera de equilibrio). Este último promedio decae a cero a medida que el tiempo en que se promedia tiende a infinito.

Finalmente, las perspectivas a futuro sobre el trabajo presentado continúan en dos direcciones distintas. Por una parte es de interés profundizar en el concepto de ausencia de equilibrio termodinámico en las partículas *run and tumble*. Un buen camino a seguir es caracterizar el flujo de entropía a través de las relaciones recíprocas de Onsager, las cuales expresan la igualdad en razones de flujos y fuerzas termodinámicas en sistemas fuera de equilibrio, pero en los que existe una noción de equilibrio local (43). Paralelamente podría plantearse experimentos en los que se midan los desplazamientos cuadráticos medios en medios acuosos con temperatura inhomogénea. Antes de proponer un experimento en el que se reproduzcan las condiciones de los potenciales y perfiles de temperatura presentados en este trabajo, tendría que fijarse el tamaño y masa de las partículas a estudiar, pues en buena medida éstas determinarían el tipo de trampas a emplear (ópticas (44) o acústicas (34)). Posteriormente, debe proponerse un método con el que se logre un medio de temperatura inhomogénea en las dimensiones espaciales donde funcione el atrapamiento dado por las trampas ópticas o acústicas. Un buen punto de partida sería un potencial armónico y un perfil de temperatura cuadrático, en donde sabemos que se pueden observar todos los efectos del nado de las partículas sin importar el tamaño del dominio.



# Integración numérica de la ecuación de Langevin

---

Como se mencionó en el primer capítulo, integrar una ecuación diferencial estocástica, en la cual la aleatoriedad depende de un término  $\xi$  equivale a responder, cómo debe estar distribuida su integral; es decir, si  $\xi(t) = dW(t)/dt$ , cuál es la distribución  $p$  que sigue  $W$  ( $W \sim p(W)$ ).

Nuevamente empleamos el truco de sustituir  $\xi(t)$  por la derivada de otra función estocástica,  $d\omega(t)/dt$ , y resolver para esta nueva variable  $\omega(t)$ .

La discretización a primer orden de la ecuación de Langevin en el límite sobreamortiguado 1.26, después de sustituir  $\xi$  por  $d\omega$  nos da:

$$\frac{x(t + \Delta t) - x(t)}{\Delta t} = -\mu U'(x) + \sqrt{2\mu k_B T(x)} \frac{\omega(t + \Delta t) - \omega(t)}{\Delta t}. \quad (\text{A.1})$$

Adimensionalizando esta ecuación en términos de las variables  $g_1$  y  $g_2$  obtenemos:

$$x(t + \Delta t) = x(t) - \Delta t g_1^{-1} U'(x) + \sqrt{2g_1^{-1} g_2^{-1} T(x)} [\omega(t + \Delta) - \omega(t)]. \quad (\text{A.2})$$

Recordemos que posterior a la ecuación 1.14 concluimos que la variable  $\omega$  se trata de un proceso de Wiener. Una de sus propiedades es su autocorrelación, la cual satisface:

$$\langle \omega(t)\omega(t') \rangle = \int_0^t \int_0^{t'} \langle \xi(s)\xi(s') \rangle ds ds' = \int_0^t \int_0^{t'} \delta(s - s') ds ds' = \min\{t, t'\}. \quad (\text{A.3})$$

Para probar este último paso, consideramos por separado los casos cuando  $t > t'$  y  $t' > t$ . La delta de Dirac es no nula en  $s = s'$ , lo cual ocurre siempre que integremos sobre el intervalo de mayor longitud ( $\max\{t, t'\}$ ), dejando la segunda integral en el intervalo de menor longitud ( $\min\{t, t'\}$ ). Esta segunda integral es simplemente la integral de la constante 1, en el intervalo. Con esta relación podemos obtener el valor de la autocorrelación de  $\omega(t + \Delta t) - \omega(t)$ , para mismos valores de  $t$  y  $\Delta t$ , es decir, la varianza de:  $\langle [\omega(t + \Delta t) - \omega(t)]^2 \rangle$ . Dada la linealidad del promedio  $\langle \cdot \rangle$ , el valor de la autocorrelación se descompone,

$$\begin{aligned} \langle [\omega(t + \Delta t) - \omega(t)]^2 \rangle &= \langle \omega(t + \Delta t)^2 \rangle + \langle \omega(t)^2 \rangle - 2 \langle \omega(t + \Delta t)\omega(t) \rangle \\ &= t + \Delta t + t - 2t = \Delta t. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

El valor de  $\Delta t$  es constante, y para el caso discreto, finito. Sabemos que si  $\eta(t)$  es una variable aleatoria que sigue una distribución normal, tendrá una varianza unitaria, por lo que  $\sqrt{\Delta t}\eta(t)$  tendrá varianza  $\Delta t$ .

Al sustituir  $\omega(t + \Delta t) - \omega(t)$  por la nueva variable  $\eta(t)$ , garantizamos que los momentos estadísticos se satisfacen, y nos permite tener un esquema conciso de integración, pues la implementación de rutinas que generen números normales suele ser directa en diversos lenguajes de programación, en particular en `python`, lenguaje empleado para el trabajo numérico en esta tesis. Finalmente, la ecuación empleada en la integración de Langevin es:

$$x(t + \Delta t) = x(t) - \Delta t g_1^{-1} U'(x) + \sqrt{2g_1^{-1}g_2^{-1}T(x)} \sqrt{\Delta t} \eta(t). \quad (\text{A.5})$$

## A.1. Pseudocódigo

La ecuación de Langevin es una ecuación diferencial de primer orden y el integrador propuesto es igualmente de primer orden, por lo que es posible llevar a cabo la integración de  $x_i$  a  $x_{i+1}$  en un sólo cálculo por iteración. A continuación presentamos un pseudocódigo para integrar la dinámica de Langevin donde hemos sustituido la nomenclatura de  $t$  y  $\Delta t$ , por pasos discretos de tiempo  $i$ , con incrementos  $h$ .

**Estructura general del código**

```

Definir evolución( $x, h$ )
Inicializar Partículas, Iteraciones,  $x_{\text{máx}}$ ,  $x_{\text{mín}}$ ,  $h$ ,  $X$ 
for  $p$  in (1,Partículas):
    Definir  $x$ 
     $x_0 = 0$ 
    for  $i$  in (1,Iteraciones):
         $x_{i+1} = \text{evolución}(x_i, h)$ 
        si  $x_{i+1} > x_{\text{máx}}$  o  $x_{i+1} < x_{\text{mín}}$ :
             $x_{i+1} = x_i$ 
     $X = (X, x)$ 

```

La condición dentro de la función booleana **si**, es la condición impuesta sobre las fronteras al restringirnos en el intervalo donde  $T(x) > 0$ . La variable  $x$  definida para cada partícula, es un vector de longitud igual al número de iteraciones, en el cual se guardan las posiciones durante su evolución. La variable  $X$  es un vector de longitud igual al número de iteraciones por el número de partículas, en el cual se concatenan todas las trayectorias integradas individualmente. Asimismo, la función de evolución representa a la ecuación A.5, descrita algorítmicamente como:

**Integración de Langevin con temperatura efectiva**

```

evolución( $x, h$ )
     $e = \text{normal}(0, 1)$ 
     $y = x - hdU(x)/g1 + \sqrt{2T(x)h/(g1g2)}e$ 
regresa  $y$ 

```

La función normal(0,1) regresa un número distribuido normalmente (Gaussiano con media 0 y desviación estándar 1), la cual está implementada en diversos lenguajes de programación. Las funciones  $dU(x)$  y  $T(x)$  son la derivada del potencial externo y la temperatura efectiva asociada a dicho potencial. Dependiendo del lenguaje de programación puede ser necesario incluir dichas funciones en el argumento de la función evolución( $x, h$ ).

**A.2. Código**

Presentamos el siguiente código con el fin de concretar las ideas del pseudocódigo. La temperatura efectiva y el potencial externo corresponde al pozo biestable asimétrico y el lenguaje empleado es **Fortran 95**. Cabe mencionar tanto el potencial se Zwanzig y el potencial jerárquico fueron integrados en **Python** (por simplicidad en el uso de funciones); sin embargo, la estructura del código es la misma.

## A. INTEGRACIÓN NUMÉRICA DE LA ECUACIÓN DE LANGEVIN

---

```
1  program langevin
2  !Declaracion de parametros generales
3  integer it , npart
4  !Declaracion de vectores y valores de la evolucion
5  real x, y, a, xmin, xmax, g1, g2, dt, val(6)
6  !Declaracion de funciones
7  real dU, T, norm, evol
8  !Declaracion de nombres de archivos
9  character*9  :: filename
10 character*54 :: fileplace
11
12 fileplace="C:\Users\hp\Documents\Thesis\DoublewellDoneRight\data\"
13 !Parametros generales, asimetria, g1, xmax y xmin de acuerdo a g1
14 a= 0.01
15 g1= 0.78325195312500018
16 xmin =-1.26290878438
17 xmax=1.27970694231
18 !Valores de g2
19 val(1)=3.2277944
20 val(2)=6.4555888
21 val(3)= 6.52079348
22 val(4)=6.58599815
23 val(5)=13.1719963
24 val(6)= 65.8599815
25
26 it = 100000
27 npart = 100
28 dt=1e-4
29
30 do k=1, 6 !iteracion sobre g2
31   g2 = val(k)
32   write(filename, '( "lan_",I1, ".dat" )' ) k
33   open(1, file=fileplace//filename)
```

```

34   do i=1, npart !iteracion sobre el ensamble
35       x = (xmax-xmin)*rand()+xmin
36       do j=1, it !iteracion temporal individual
37           y = evol(x, dt, g1, g2, a)
38           if (y > xmax .or. y < xmin) then !condicion de frontera
39               y = x
40           end if
41           write(1,*) y
42           x = y
43       enddo
44   enddo
45   close(1)
46 enddo
47
48 end
49
50
51 real function norm(r1, r2)!Funcion que genera numeros aleatorios
normalmente distribuidos
52   real pi
53   pi = 4.0*atan(1.0)
54   norm = sqrt(-2.0*log(r1))*cos(2.0*pi*r2)
55 end
56
57 real function evol(x, dt, g1, g2, a) !Integracion de Langevin
58   real norm, dU, T, e
59   e = norm(rand(), rand())
60   evol = x-dt*dU(x, a)/g1 + sqrt(2.0*T(x, g1, a)*dt/(g1*g2))*e
61 end
62
63 real function dU(x, a) !Derivada del potencial externo
64   dU = x**3 - 2.*a*x**2. - x
65 end

```

## A. INTEGRACIÓN NUMÉRICA DE LA ECUACIÓN DE LANGEVIN

---

```
66
67  real function T(x, g1, a) !Temperatura efectiva
68     T = 1-dU(x, a)**2/g1**2
69  end
```

## Bibliografía

---

- [1] C. Bechinger, R. Di Leonardo, H. Löwen, C. Reichhardt, G. Volpe, and G. Volpe, “Active particles in complex and crowded environments,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 88, p. 045006, Nov 2016. [XI, 2, 4](#)
- [2] S. Ramaswamy, “The mechanics and statistics of active matter,” *Annual Review of Condensed Matter Physics*, vol. 1, no. 1, pp. 323–345, 2010. [2](#)
- [3] M. E. Cates, “Diffusive transport without detailed balance in motile bacteria: does microbiology need statistical physics?,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 75, no. 4, p. 042601, 2012. [2](#)
- [4] N. Komin, U. Eerdmann, and L. Schimasnky-Geier, “Random walk theory applied to daphnia motion,” *Fluctuation and Noise Letters*, vol. 04, no. 01, pp. L151–L159, 2004. [2](#)
- [5] W. F. Paxton, K. C. Kistler, C. C. Olmeda, A. Sen, S. K. St. Angelo, Y. Cao, T. E. Mallouk, P. E. Lammert, and V. H. Crespi, “Catalytic nanomotors: autonomous movement of striped nanorods,” *Journal of the American Chemical Society*, vol. 126, no. 41, pp. 13424–13431, 2004. PMID: 15479099. [2](#)
- [6] H.-R. Jiang, N. Yoshinaga, and M. Sano, “Active motion of a janus particle by self-thermophoresis in a defocused laser beam,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 105, p. 268302, Dec 2010. [2](#)
- [7] I. Buttinoni, G. Volpe, F. Kümmel, G. Volpe, and C. Bechinger, “Active brownian motion tunable by light,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 24, no. 28, p. 284129, 2012. [2](#)
- [8] F. Kümmel, B. ten Hagen, R. Wittkowski, I. Buttinoni, R. Eichhorn, G. Volpe, H. Löwen, and C. Bechinger, “Circular motion of asymmetric self-propelling particles,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 110, p. 198302, May 2013. [2](#)

## BIBLIOGRAFÍA

---

- [9] G. Volpe, I. Buttinoni, D. Vogt, H.-J. Kummerer, and C. Bechinger, “Microswimmers in patterned environments,” *Soft Matter*, vol. 7, pp. 8810–8815, 2011. 2
- [10] J. R. Howse, R. A. L. Jones, A. J. Ryan, T. Gough, R. Vafabakhsh, and R. Golestanian, “Self-motile colloidal particles: From directed propulsion to random walk,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 99, p. 048102, Jul 2007. 2
- [11] J. Li, V. V. Singh, S. Sattayasamitsathit, J. Orozco, K. Kaufmann, R. Dong, W. Gao, B. Jurado-Sanchez, Y. Fedorak, and J. Wang, “Water-driven micromotors for rapid photocatalytic degradation of biological and chemical warfare agents,” *ACS Nano*, vol. 8, no. 11, pp. 11118–11125, 2014. PMID: 25289459. 2
- [12] P. A. Corning, “The re-emergence of “emergence”: A venerable concept in search of a theory,” *Complexity*, vol. 7, no. 6, pp. 18–30, 2002. 3
- [13] T. Vicsek, A. Czirók, E. Ben-Jacob, I. Cohen, and O. Shochet, “Novel type of phase transition in a system of self-driven particles,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 75, pp. 1226–1229, Aug 1995. 3
- [14] P. Romanczuk, M. Bär, W. Ebeling, B. Lindner, and L. Schimansky-Geier, “Active Brownian Particles: From Individual to Collective Stochastic Dynamics,” *The European Physical Journal Special Topics*, vol. 202, pp. 1–162, 2012. 5, 7
- [15] U. Börner, A. Deutsch, H. Reichenbach, and M. Bär, “Rippling patterns in aggregates of myxobacteria arise from cell-cell collisions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 89, p. 078101, Jul 2002. 5
- [16] R. Brown, “A brief account of microscopical observations made on the particles contained in the pollen of plants,” *Philosophical Magazine*, vol. 4, pp. 161–173, 1828. 6
- [17] C. Wiener *Poggendorffs Annal*, vol. 189, 1863. 7
- [18] A. Einstein, “Zur theorie der brownischen bewegung,” *Annalen der Physik*, vol. 324, no. 2, pp. 371–381, 1906. 7
- [19] M. von Smoluchowski, “Zur kinetischen theorie der brownischen molekularbewegung und der suspensionen,” *Annalen der Physik*, vol. 326, no. 14, pp. 756–780, 1906. 7
- [20] P. Langevin, “On the Theory of Brownian Motion,” *C.R. Seances Acad. Sci. (Paris)*, vol. 146, pp. 530–533, 1908. 7

- [21] S. S. Ioannis Karatzas, *Brownian Motion and Stochastic Calculus*. The address: Springer-Verlag New York, 2 ed., 1998. [12](#)
- [22] E. M. Purcell, “Life at low reynolds number,” *American Journal of Physics*, vol. 45, no. 1, pp. 3–11, 1977. [15](#)
- [23] A. Fick, “Ueber diffusion,” *Annalen der Physik*, vol. 170, no. 1, pp. 59–86, 1855. [17](#)
- [24] M. J. Schnitzer, “Theory of continuum random walks and application to chemotaxis,” *Phys. Rev. E*, vol. 48, pp. 2553–2568, Oct 1993. [18](#)
- [25] G. I. Taylor, “Diffusion by continuous movements,” *Proceedings of the London Mathematical Society*, vol. s2-20, no. 1, pp. 196–212, 1922. [18](#)
- [26] S. Goldstein, “On diffusion by discontinuous movements, and on the telegraph equation,” *The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*, vol. 4, no. 2, pp. 129–156, 1951. [18](#), [21](#)
- [27] J. S. Francisco, A. V. Arzola, and E. P. Cital, “The non-equilibrium nature of active motion: Turning passive brownian particles into active ones.” *No publicado*. Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, 2017. [24](#), [26](#), [27](#), [30](#), [39](#)
- [28] A. P. Solon, M. E. Cates, and J. Tailleur, “Active brownian particles and run-and-tumble particles: A comparative study,” *European Physical Journal Special Topics*, vol. 224, July 2015. [26](#)
- [29] C. Bechinger, R. Di Leonardo, H.öwen@, C. Reichhardt, G. Volpe, and G. Volpe, “Active Particles in Complex and Crowded Environments,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 88, p. 045006, Oct. 2016. [26](#)
- [30] R. Landauer, “Inadequacy of entropy and entropy derivatives in characterizing the steady state,” *Phys. Rev. A*, vol. 12, pp. 636–638, Aug 1975. [28](#)
- [31] S. Duhr and D. Braun, “Why molecules move along a temperature gradient,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 103, no. 52, pp. 19678–19682, 2006. [30](#)
- [32] J. Tailleur and M. E. Cates, “Sedimentation, trapping, and rectification of dilute bacteria,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 86, no. 6, p. 60002, 2009. [35](#)
- [33] H. Stark, “Swimming in external fields,” *The European Physical Journal Special Topics*, vol. 225, pp. 2369–2387, Nov 2016. [35](#)

## BIBLIOGRAFÍA

---

- [34] Takatori Sho C., De Dier Raf, Vermant Jan, and Brady John F., “Acoustic trapping of active matter,” *Nature Communications*, vol. 7, p. 10694, mar 2016. [35](#), [75](#)
- [35] F. Schmidt, B. Liebchen, H. Lowen, and G. Volpe, “Light-controlled Assembly of Active Colloidal Molecules,” *ArXiv e-prints*, Jan. 2018. [35](#)
- [36] A. Dominguez, P. Malgaretti, M. N. Popescu, and S. Dietrich, “Collective dynamics of chemically active particles trapped at a fluid interface,” *Soft Matter*, vol. 12, pp. 8398–8406, 2016. [35](#), [74](#)
- [37] J. Naudts, “The  $q$ -exponential family in statistical physics,” *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 201, no. 1, p. 012003, 2010. [39](#)
- [38] Y. Tian, T. Kucharski, Q.-Z. Yang, and R. Boulatov, “Model studies of force-dependent kinetics of multi-barrier reactions,” *Nature Communications*, vol. 4, p. 2538, Sept. 2013. [41](#)
- [39] R. Zwanzig, “Diffusion in a rough potential,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 85, no. 7, pp. 2029–2030, 1988. [49](#), [50](#)
- [40] A. Ansari, J. Berendzen, S. F. Bowne, H. Frauenfelder, I. E. Iben, T. B. Sauke, E. Shyamsunder, and R. D. Young, “Protein states and proteinquakes,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 82, no. 15, pp. 5000–5004, 1985. [49](#)
- [41] K. Weierstrass, “Über continuirliche functionen eines reellen arguments, die für keinen werth des letzteren einen bestimmten differentialquotienten besitzen,” vol. 2, pp. 71–74, 01 1988. [62](#)
- [42] M. Mijalkov and G. Volpe, “Sorting of chiral microswimmers,” *Soft Matter*, vol. 9, p. 6376, 2013. [74](#)
- [43] L. Onsager, “Reciprocal relations in irreversible processes. i.,” *Phys. Rev.*, vol. 37, pp. 405–426, Feb 1931. [75](#)
- [44] G. Volpe, G. Volpe, and S. Gigan, “Brownian Motion in a Speckle Light Field: Tunable Anomalous Diffusion and Selective Optical Manipulation,” *Scientific Reports*, vol. 4, p. 3936, Feb. 2014. [75](#)