



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**  
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS  
INSTITUTO DE FÍSICA

**SOBRE LA TEORÍA DE DIFUSIÓN DE PARTÍCULAS AUTOPROPULSADAS QUE  
SE MUEVEN CON RAPIDEZ CONSTANTE EN DOS DIMENSIONES**

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

PRESENTA:  
LUIS ALBERTO GÓMEZ NAVA

TUTOR PRINCIPAL  
DR. FRANCISCO JAVIER SEVILLA PÉREZ  
INSTITUTO DE FÍSICA

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR  
DR. VICTOR MANUEL ROMERO ROCHÍN  
INSTITUTO DE FÍSICA  
DR. VICTOR DOSSETTI ROMERO  
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

MÉXICO, D. F. OCTUBRE 2014



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.

# Índice general

<b>Agradecimientos</b>	<b>VII</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Plan de la tesis . . . . .	3
<b>2. Marco teórico de partículas activas</b>	<b>5</b>
2.1. Introducción histórica . . . . .	5
2.1.1. Movimiento browniano . . . . .	5
2.1.2. Primeros experimentos sobre movimiento browniano . . . . .	7
2.1.3. Ecuación de Langevin . . . . .	9
2.2. Ecuación de Fokker–Planck . . . . .	11
2.3. Oblicuidad y curtosis . . . . .	13
2.4. Modelos de partículas autopropulsadas . . . . .	17
2.5. Modelos matemáticos de partículas autopropulsadas . . . . .	18
2.5.1. Fricción no lineal . . . . .	18
2.5.2. Modelos de depósitos internos de energía . . . . .	21
2.5.3. Motores moleculares . . . . .	22
2.6. Sistemas discretos de caminantes aleatorios persistentes . . . . .	24
2.7. Trabajos en espacios discretos . . . . .	27
<b>3. Partículas con rapidez constante</b>	<b>31</b>
3.1. Ecuaciones de Langevin para agentes brownianos con rapidez constante . . . . .	31
3.2. Ecuación de Fokker–Planck . . . . .	32
3.3. Solución a la ecuación de Fokker–Planck . . . . .	35
3.3.1. Aproximación con tres modos (régimen difusivo) . . . . .	38
3.3.2. Aproximación con cinco modos . . . . .	41
<b>4. Resultados y discusión</b>	<b>45</b>
4.1. El desplazamiento cuadrático medio (DCM) . . . . .	45
4.2. Resultados de oblicuidad y curtosis . . . . .	50

4.3. Corroboración experimental . . . . .	56
4.4. Comparación en el espacio de Fourier . . . . .	57
<b>5. Conclusiones</b>	<b>61</b>
<b>Appendices</b>	<b>65</b>
<b>A. Momentos del término <math>Q(x)</math></b>	<b>67</b>
A.1. Segundo momento . . . . .	67
A.2. Cuarto momento . . . . .	68
<b>B. Aproximación a la ecuación (3.42)</b>	<b>71</b>
<b>C. Derivación de la ecuación (3.39)</b>	<b>75</b>

# Índice de figuras

1.1.	Trayectoria de una amiba tomada con una frecuencia de 2 Hz. Tomada de [?]. . . . .	2
1.2.	Nueve trayectorias de peces en un tanque ordenadas en función de la velocidad promedio. La velocidad promedio más baja es la del pez F1 ( $v = 0.16 \frac{m}{s}$ ) y la más alta la del pez F9 ( $v = 0.56 \frac{m}{s}$ ) [?]. . . . .	3
2.1.	Trayectoria característica de una partícula browniana en un medio [?]. . . . .	6
2.2.	Se muestra una trayectoria de un protozoo hecha a mano con un aparato de rastreo mecánico operado en tiempo real con un microscopio, reportada en el trabajo de Przi Bram. Se utilizó un metrónomo para marcar el tiempo cada cuatro segundos [?]. . . . .	9
2.3.	Distribuciones con curtosis positiva y negativa. . . . .	15
2.4.	Dinámica de partículas con interacción de alineamiento, como las estudió Vicsek et al. [?]. La velocidad de la partícula está dada por una pequeña flecha y la trayectoria en los últimos 20 pasos de tiempo está denotada por una línea continua. . . . .	18
2.5.	Partículas activas en un medio con densidad de obstáculos $\rho_0$ , denotados por puntos rojos en la figura. Si la velocidad de evasión $\gamma$ de las partículas y la densidad de obstáculos del medio son altas, ocurre un atrapamiento de las partículas como se muestra en esta figura, reportada en el trabajo de Chepizhko y Peruani [?]. . . . .	19
2.6.	Ejemplo de fricción no lineal $\gamma(\mathbf{v})$ [?]. . . . .	20
2.7.	Proyecciones de una trayectoria estocástica en el espacio fase tridimensional $(x_1, x_2, v_2)$ para las figuras (a) y (c), $(v_1, v_2, x_2)$ para las figuras (b) y (d) [?]. . . . .	21
2.8.	Partículas activas hechas por el hombre. . . . .	23

- 2.9. Probabilidad radial de las distribuciones en dos dimensiones.  $2\pi r P_{\text{Exacta}}(r, t)$  es la línea sólida,  $2\pi r P_{\text{Telegrafista}}(r, t)$  es la línea a rayas, y  $2\pi r P_{\text{Dif}}(r, t)$  es la línea a rayas y puntos. Ambas gráficas se obtuvieron con los valores  $\gamma = v_0 = 1$ . . . . . 26
- 2.10. Caminante aleatorio persistente confinado en una red cúbica en tres dimensiones [?]. . . . . 27
- 3.1. Imágenes tomadas de datos obtenidos de un programa escrito en Java para los tiempos: (a)  $t\gamma = 0.1$  y una curtosis  $\kappa = 4.003$ , (b)  $t\gamma = 1.25$  y una curtosis  $\kappa = 4.33$ , (c)  $t\gamma = 7.5$  y una curtosis  $\kappa = 6.352$ , (d)  $t\gamma = 225$  y una curtosis  $\kappa = 7.938$ . Hay que notar que los ejes han sido reescalados para poder observar bien toda la distribución. . . . . 32
- 4.1. Desplazamiento cuadrático medio (DCM) en unidades de  $(v_0/\gamma)^2$  vs.  $\gamma t = \tilde{t}$ . La línea continua en color azul es la aproximación analítica dada por la expresión (4.15), los datos que se muestran en puntos se obtuvieron al promediar la solución numérica de las ecuaciones (3.1), considerando  $10^5$  trayectorias e integrando sobre  $2 \times 10^6$  pasos de tiempo. . . . . 49
- 4.2. Curtosis  $\kappa$  para las soluciones circularmente simétricas de la ecuación del telegrafista (3.27) (línea continua púrpura), nuestra generalización de la misma (3.40) (línea continua verde) y la solución exacta obtenida de las simulaciones numéricas de las ecuaciones (3.1) (datos graficados con puntos) vs  $t\gamma = \tilde{t}$ . Los límites importantes (tanto para tiempos largos como para tiempos cortos) están marcados con líneas continuas horizontales en los valores 8, 4 y  $\frac{8}{3} \simeq 2.6667$  que corresponden a los valores de  $\kappa$  para distribuciones en dimensión 2 de los siguientes casos: la distribución gaussiana, la distribución de partículas que se mueven con rapidez constante y para soluciones circularmente simétricas de la ecuación de onda, respectivamente. Las soluciones numéricas se llevaron a cabo promediando  $10^5$  trayectorias de simulaciones de las ecuaciones (3.1) e integrando sobre  $2 \times 10^6$  pasos de tiempo. . . . . 55

4.3. Las líneas en color son las gráficas de la densidad de probabilidad  $\tilde{P}_0(k, t)$  como función de  $k = |\mathbf{k}|$  a cuatro tiempos diferentes:  $\gamma t = 0.1$ ,  $\gamma t = 1.0$ ,  $\gamma t = 10.0$ , y  $\gamma t = 100.0$  en las figuras (a), (b), (c) and (d), respectivamente. La gráfica punteada en azul corresponde a la solución de la ecuación generalizada del telegrafista (3.40), mientras que la gráfica roja corresponde a la solución de la ecuación del telegrafista en dos dimensiones (3.27). La gráfica en gris en las figuras (a) y (b) corresponde a la solución normalizada de la ecuación de onda en 2 dimensiones con velocidad de propagación  $v_0\sqrt{2}$  (4.33). La gráfica en gris en las figuras (c) y (d) corresponde a la solución a la ecuación de difusión, que es una gaussiana. . . . . 58





*Habe Mut, dich deines eigenen Verstandes zu bedienen!*  
*Immanuel Kant*



# Agradecimientos

Agradezco antes que nadie a mi familia, Mireya, Matilde y Luis Manuel, mis personas favoritas de la vida. Sin su apoyo, habría sido más difícil acabar la tesis. Soy afortunado por ser parte de su familia, nuestra familia.

Agradezco también a mi tutor Francisco Sevilla, con quien logré establecer un equipo de trabajo muy satisfactorio y fructífero. Me siento afortunado de contar con su apoyo y amistad, la cual espero mantener muchos años.

Agradezco a mis amigos Iker, Arturo, Citlali, Omar, Talía, Rebeca, Mafer, Mario, David, Corinto, Gisela, Marce y Corro. Ustedes me hacen crecer como persona cada día que paso a su lado. Atesoraré su amistad y nuestros recuerdos para siempre.

Agradezco a toda mi familia materna y paterna. Gracias por el apoyo tan grande.

Agradezco a mi familia Camacho-Nájera, por hacerme sentir un cariño y una amistad tan grande como nuestra afición por las chivas.

En la vida, también encontré personas especiales y singulares que de una u otra manera, me ayudaron a encontrar y elegir el camino en el que me encuentro hoy. Algunas de ellas son Viridiana, Rodrigo, Diana y Arheli.

Mención especial merece Natalia Garduño y su familia, quienes fueron un parteaguas en mi vida. Gracias por haberme dado un regalo de vida tan valioso, el cual disfrutaré el resto de mis días. Ustedes, y sobre todo Natalia, tendrán siempre un lugar muy especial en mi corazón. Los amo.

Agradezco también a mi comité sinodal integrado por el Dr. Denis Pierre Boyer, el Dr. Hernán Larralde Ridaura, el Dr. José Inés Jiménez Aquino y el Dr. David Philip Sanders. Su apoyo y sobre todo sus valiosos comentarios

sobre la tesis me han brindado el placer de entender un poquito más al mundo.

Agradezco también a mi tutor de licenciatura, el Dr. Victor Romero, por brindarme siempre un buen consejo y aceptar formar parte de mi comité tutor del posgrado.

Por último agradezco al Posgrado en Ciencias Físicas (PCF), al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) , al Instituto de Física de la UNAM (IFUNAM) , a DGAPA-UNAM y al apoyo PAPIIT IN113114 titulado "Fenómenos colectivos en sistemas de agentes brownianos en interacción".

# Resumen

En esta tesis se utilizan ecuaciones tipo Langevin y su correspondiente ecuación de Fokker–Planck para describir partículas activas sin interacción que se mueven con rapidez constante en dos dimensiones y para desarrollar un método sistemático que permite obtener la densidad de probabilidad de encontrar una partícula en una posición a un tiempo dado. Este método permite obtener una generalización a la ecuación del telegrafista para tiempos cortos. Dicha generalización preserva la estructura hiperbólica de la ecuación del telegrafista e incorpora efectos de memoria en el término difusivo. Aún cuando no hay diferencia al graficar el desplazamiento cuadrático medio de las soluciones de la ecuación del telegrafista y la generalización de la misma, la curtosis resulta ser un parámetro sensible que discierne entre ambas aproximaciones. Complementado con un análisis en el espacio de Fourier, esta tesis nos da una idea de por qué la ecuación del telegrafista no es un modelo apropiado para describir la propagación de partículas con rapidez constante en medios dispersivos.



# Abstract

In this thesis, a Langevin description of active particles without interaction that move with constant speed in infinite two-dimensional space and its corresponding Fokker–Planck equation are used in order to develop a systematic method that allows to obtain the probability density of finding a particle at a given location and at a given time in arbitrary short-time regimes. By going beyond the diffusive limit, a generalization of the telegrapher’s equation is derived. Such generalization preserves the hyperbolic structure of the equation and incorporates memory effects in the diffusive term. While no difference is observed for the mean-square displacement computed from the two-dimensional telegrapher’s equation and from the new derived generalization, the kurtosis results in a sensible parameter that discriminates between both approximations. A comparative analysis in Fourier space is derived and sheds light on why the standard telegrapher’s equation is not an appropriate model to describe the propagation of particles with constant speed in dispersive media.





# 1

## Introducción

El estudio de los procesos estocásticos tuvo una motivación observacional hecha a mediados del siglo XIX, así como una contraparte teórica desarrollada tiempo después. Aún cuando el nombre del botánico Robert Brown está relacionado con el movimiento browniano, no fue el primero en observarlo [?]. El fenómeno del movimiento irregular de partículas de polvo de carbón inmersas en un fluido había sido reportado por Jan Ingen-Housz en 1784 (Ingen-Housz 1784) [?]. La contribución de Brown fue el llevar a cabo observaciones cuidadosas del fenómeno para partículas orgánicas e inorgánicas y concluir que ésta era una propiedad general de objetos microscópicos en un fluido.

Las observaciones del movimiento errático de organelos micrométricos en agua fueron hechas por el botánico escocés en 1827 [?], pero no fue sino hasta principios del siglo XX cuando se abordó el tema de una manera teórica por científicos como Albert Einstein [?] y Paul Langevin [?]. El trabajo de ambos científicos se mantiene vigente y es utilizado como referencia y material de discusión.

El trabajo de Langevin sobre el movimiento browniano es, en sus propias palabras, “*infinitamente más simple*” que el trabajo de Albert Einstein. El científico alemán, utilizando hipótesis físicamente razonables, derivó y resolvió una ecuación diferencial parcial que describía la dinámica temporal de la densidad de probabilidad de una partícula browniana (es decir, una ecuación de Fokker–Planck). En contraparte, Langevin utilizó la segunda Ley de Newton y estableció una ecuación de fuerzas para los procesos estocásticos que ahora lleva por nombre Ecuación de Langevin [?].

Hoy en día se ha observado que la aparente simplicidad del trabajo de Lange-

vin traía como costo el generar nuevos objetos matemáticos y herramientas con propiedades inusuales. Langevin manipulaba estos objetos, como por ejemplo ruido blanco gaussiano o ecuaciones diferenciales estocásticas, de manera cautelosa e intuitiva y hoy en día se ha desarrollado todo un formalismo que se utiliza para trabajar problemas similares [?]. De esta manera, el trabajo del científico francés inspiró nuevas matemáticas, así como una nueva física.

Las ecuaciones de Langevin y de Fokker–Planck describen la física de procesos estocásticos markovianos (sin memoria) en el continuo. De hecho, ambos estudios arrojaron independientemente el mismo resultado: el desplazamiento cuadrático medio se incrementa linealmente con el tiempo para un sistema de partículas brownianas libres. Esta cantidad nos da información de qué tan localizada está la partícula en función del tiempo. Para un movimiento balístico resulta depender cuadráticamente del tiempo ( $\sim t^2$ ), mientras que para un proceso difusivo depende linealmente ( $\sim t$ ) [?].

Una vez desarrolladas las herramientas teóricas matemáticas para poder estudiar los procesos estocásticos, los científicos se dieron cuenta que había muchas aplicaciones en el ámbito de la biología y medicina. Es por eso que se comenzaron a establecer modelos cada vez más cercanos a sistemas de animales [?, ?], bacterias, células [?] y sistemas fotónicos [?]. En las Figuras 1.1 y 1.2 se pueden apreciar trayectorias de sistemas biológicos tomadas experimentalmente.

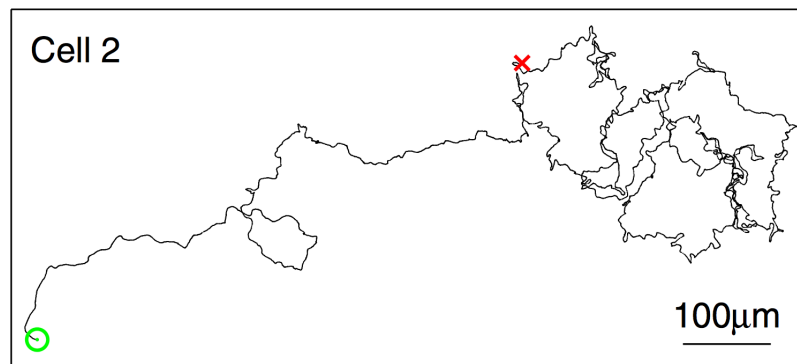


Figura 1.1: Trayectoria de una amiba tomada con una frecuencia de 2 Hz. Tomada de [?].

Dado que estos sistemas no están en equilibrio, se tuvieron que introducir nuevos conceptos teóricos para así poder establecer modelos más cercanos a

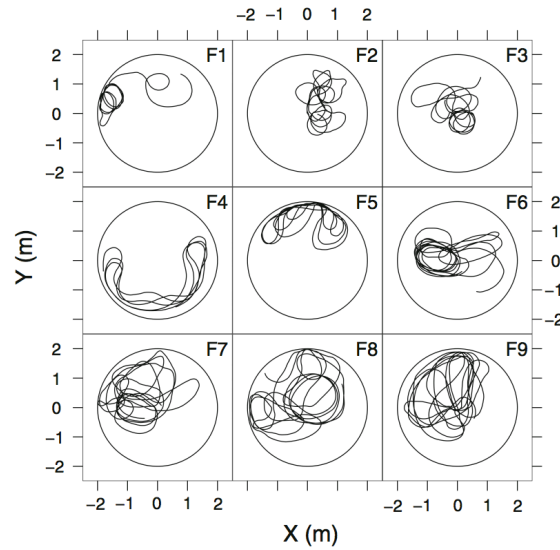


Figura 1.2: Nueve trayectorias de peces en un tanque ordenadas en función de la velocidad promedio. La velocidad promedio más baja es la del pez F1 ( $v = 0.16 \frac{m}{s}$ ) y la más alta la del pez F9 ( $v = 0.56 \frac{m}{s}$ ) [?].

la realidad. Uno de estos conceptos, que es en el que estamos interesados, es el de autopropulsión [?]. Cuando uno habla de autopropulsión se refiere a mecanismos intrínsecos de las partículas que les permiten tomar energía del medio en el que se encuentran y convertirla en energía cinética para seguir moviéndose. A las partículas que tienen esta capacidad se les llama partículas activas. Hay muchas maneras de introducir la autopropulsión, las cuales se describirán detalladamente en el capítulo siguiente. Otro concepto también de mucha importancia en sistemas físicos es el de interacción entre partículas [?], la cual puede ser de naturaleza métrica o topológica. La primera establece interacción entre dos partículas en función de su separación [?, ?], mientras que en la segunda la interacción se lleva a cabo con un determinado grupo de partículas [?]. Cabe mencionar que el formalismo de Langevin es la herramienta fundamental que permite la introducción de conceptos como éstos [?].

## 1.1. Plan de la tesis

Esta tesis utiliza precisamente el formalismo de Langevin para plantear las ecuaciones y así estudiar la dinámica de un sistema de partículas autopropulsadas sin interacción que se mueven en dos dimensiones con rapidez cons-

tante. Se complementa el análisis con el formalismo de Fokker–Planck. El objetivo de la tesis es obtener la ecuación de Fokker–Planck del modelo, así como aproximaciones analíticas a la solución de la misma, para después evaluar qué tan buenas resultan ser. En el desarrollo del presente trabajo se encuentra que la aproximación a tiempos largos para la distribución de probabilidad resulta ser la solución a la ecuación del telegrafista en dos dimensiones, algo que ya se había estudiado en [?]. El aporte de esta tesis es la segunda aproximación a tiempos mas cortos para la distribución de probabilidad. La ecuación que se encuentra es una generalización de la ecuación del telegrafista, la cual conserva una estructura similar a la misma pero incorpora un término de memoria temporal, así como un término inhomogéneo. Se hace un estudio para comparar estas dos aproximaciones utilizando el desplazamiento cuadrático medio, la curtosis y las soluciones en el espacio de Fourier.

Se comenzará con una introducción al marco teórico. En el capítulo 2 se tocarán y explicarán los temas necesarios para poder comprender las herramientas teóricas utilizadas. Se dará también una visión de los avances que se han realizado en el campo de las partículas activas. Al terminar este marco teórico se procederá a introducir en el capítulo 3 el modelo de partículas autopropulsadas con rapidez constante en términos de ecuaciones de Langevin. En este mismo capítulo se derivará la ecuación de Fokker–Planck correspondiente, así como las primeras dos aproximaciones analíticas al modelo. En este tercer capítulo es donde aparece el resultado novedoso del trabajo, que es nuestra generalización de la ecuación del telegrafista en dos dimensiones. Teniendo ambas aproximaciones a la solución de la ecuación de Fokker–Planck, se procederá a discutir, en el capítulo 4, los resultados en términos del desplazamiento cuadrático medio y la curtosis para finalmente concluir el trabajo. Los cálculos de algunas cantidades físicas importantes del análisis se anexan en forma de tres apéndices al final.

Los resultados reportados en la presente tesis fueron previamente enviados y aceptados para su publicación en la revista *Physical Review E*, de la APS (American Physical Society). La versión final del artículo se puede descargar de la página:

<https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.90.022130>.

## 2

# Marco teórico de partículas activas

El estudio de sistemas físicos macroscópicos en los siglos pasados hacía pensar que la ciencia no era otra cosa que modelar a la naturaleza a través de soluciones deterministas a las ecuaciones diferenciales establecidas y era común suponer que teniendo toda la información sobre las condiciones iniciales se podrían predecir eventos futuros con precisión y certeza (*demonio de Laplace*).

Mediante el desarrollo de teorías motivadas por observaciones experimentales, como por ejemplo [?], sabemos que no es así y hay al menos dos argumentos que sustentan esta creencia. El primero tiene que ver con el desarrollo de la mecánica cuántica, la cual está sustentada en un marco estadístico puro. Por otro lado nos encontramos con el concepto de caos, en el cual hay sistemas simples de ecuaciones diferenciales, cuyas soluciones tienen la propiedad de tener un comportamiento esencialmente impredecible. Esto no debe de sorprendernos, ya que va más de acuerdo con nuestra experiencia diaria que las predicciones deterministas; aún así se puede argumentar que la utilidad de los modelos predictivos muestra que la vida no es enteramente caos, sino más bien que hay un límite en el que se pueden hacer predicciones [?].

## 2.1. Introducción histórica

### 2.1.1. Movimiento browniano

Como se mencionó anteriormente, Robert Brown fue uno de los primeros en observar el movimiento estocástico de partículas. Éste observó que

pequeñas partículas orgánicas suspendidas en agua tenían un movimiento irregular. Este fenómeno fue llamado *Movimiento Browniano* por científicos como Albert Einstein [?] y estudiarlo contribuyó al conocimiento de los procesos estocásticos. Originalmente, Brown quería hallar una conexión entre este movimiento y algún tipo de manifestación de la vida pero esta hipótesis se descartó cuando se observó que estaba presente en sistemas de partículas de vidrio y minerales.

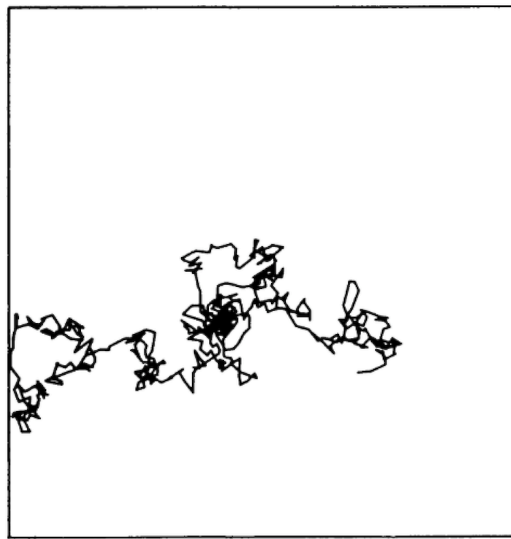


Figura 2.1: Trayectoria característica de una partícula browniana en un medio [?].

La solución al problema del movimiento browniano no llegó rápido. Una primera aproximación la hizo Louis Bachelier en 1900 [?], la cual estaba enfocada a la aplicación de los procesos estocásticos en la bolsa y las finanzas. Un acercamiento más físico llegó en 1905, cuando Albert Einstein publicó un artículo con el título *Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen* [?]. El modelo de Einstein tenía dos hipótesis muy importantes:

- (i) El movimiento tenía como origen los impactos sobre la partícula browniana que tenían una frecuencia muy alta y éstos se debían a las moléculas del líquido en el que estaba suspendida. Supone también que las moléculas de este medio circundante se encuentran en movimiento incesante, el cual es debido a fluctuaciones térmicas.

- (ii) El movimiento de las moléculas del líquido es de una naturaleza tan complicada, que sus efectos se pueden describir solamente de una manera probabilística. Considera además a los impactos como independientes.

La ecuación que Einstein obtuvo fue la siguiente:

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x^2}, \quad (2.1)$$

en donde  $f(x, t)$  es el número de partículas por unidad de volumen al tiempo  $t$ . La ecuación (2.1) es conocida como la ecuación de difusión en una dimensión y el coeficiente  $D$  es consecuentemente el coeficiente de difusión. La solución a la ecuación (2.1) es

$$f(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D}} \frac{e^{-\frac{x^2}{4Dt}}}{\sqrt{t}}. \quad (2.2)$$

Si se calcula la raíz del desplazamiento cuadrático medio se obtiene lo siguiente:

$$\lambda_x = \sqrt{\bar{x}^2} = \sqrt{2Dt}. \quad (2.3)$$

Ésta fue una predicción muy importante hecha en ese trabajo en términos del desplazamiento cuadrático medio. La importancia radica en que este desplazamiento cuadrático resultó ser el punto de comparación con la teoría desarrollada por Langevin y la desarrollada por Einstein.

Aún cuando todo este trabajo fue muy útil para el problema de movimiento browniano, Einstein no menciona este concepto en su primer trabajo [?]. Lo utiliza en un trabajo posterior llamado *Zur Theorie der Brownschen Bewegung* [?]. En este último completa varios puntos del anterior.

### 2.1.2. Primeros experimentos sobre movimiento browniano

Habiendo explicado ya que Einstein describió al movimiento browniano conectando el movimiento aleatorio de partículas microscópicas al movimiento térmico de las moléculas del fluido circundante, podemos hacer énfasis en

los primeros experimentos que se hicieron orientados a corroborar esta teoría.

El trabajo más conocido es el de Jean Baptiste Perrin [?]. En este trabajo calcularon las trayectorias de una partícula granular de radio  $0.53\mu m$  para luego calcular el desplazamiento cuadrático medio. Por este trabajo, Perrin recibió el premio Nobel de física en 1926 por su trabajo sobre la estructura discontinua de la materia, especialmente por su descubrimiento del equilibrio de sedimentación.

Otro de los primeros diseños experimentales de movimiento aleatorio de organismos vivos (que claramente son sistemas fuera de equilibrio ya que existen procesos no conservativos muy complicados de intercambio de energía con los alrededores que hacen que no haya equilibrio) se llevaron a cabo por Przi-  
bram en la segunda década del siglo XX. En su primer trabajo (1913) [?] mostró que el desplazamiento cuadrático medio de protozoarios en agua se incrementaba linealmente con el tiempo, en analogía con el movimiento browniano, pero con un coeficiente de difusión mayor al predicho por la teoría de Einstein. En la Figura 2.2 se muestra un ejemplo de los datos experimentales obtenidos con una frecuencia de 4 Hz utilizando un metrónomo. Si Przi-  
bram, que era biólogo, hubiera utilizado una mejor resolución temporal al tomar sus datos se hubiera adelantado a los avances teóricos de su tiempo, ya que lo que estaba observando no era solamente movimiento browniano, y por ende, se considera este trabajo como la primera evidencia de movimien-  
to browniano activo [?]. De hecho, en su segundo trabajo (1917), Przi-  
bram reportó coeficientes difusivos crecientes si usaba concentraciones más elevadas de protozoarios, lo que aparentemente resultó ser el primer reporte de partículas activas interactuando hidrodinámicamente [?].

Al trabajo de Przi-  
bram le siguió el de Fürth (1920) [?], un físico alemán que trabajaba en la Universidad de Praga, quien también estudió el movimiento de organismos unicelulares. Primero reprodujo los resultados de Przi-  
bram aparentemente sin conocerlos y luego se dio cuenta que sus datos no estaban descritos por (2.3). Para explicar esto introdujo la noción de *caminante aleatorio persistente*. Modeló a un caminante aleatorio en una red y le dio una persistencia direccional, es decir, una probabilidad de seguir en la misma dirección que el paso anterior. Al tomar el límite continuo obtuvo el mismo resultado que Ornstein–Uhlenbeck (1919) para el desplazamiento cuadrático medio [?]:

$$\langle x^2(t) \rangle = 2D \left( t - P \left( 1 - e^{-\frac{t}{P}} \right) \right), \quad (2.4)$$



en donde  $P = \frac{m}{f}$  es el cociente entre la masa de la partícula y la fuerza de fricción y el cual tiene unidades de tiempo. Hay que notar que para tiempos largos comparados con  $P$  se recupera la fórmula de Einstein (2.3). Por otro lado, para tiempos cortos se obtiene:

$$\langle x^2(t) \rangle = \frac{k_B T}{m} t^2. \quad (2.5)$$

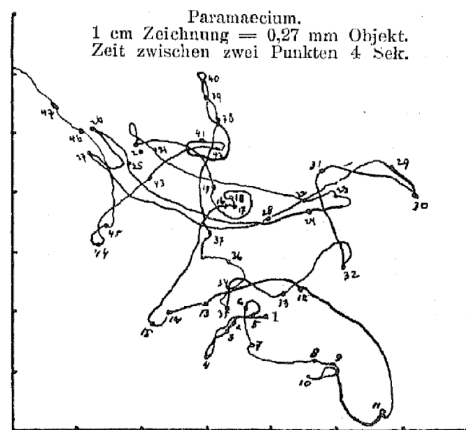


Figura 2.2: Se muestra una trayectoria de un protozario hecha a mano con un aparato de rastreo mecánico operado en tiempo real con un microscopio, reportada en el trabajo de Przibram. Se utilizó un metrónomo para marcar el tiempo cada cuatro segundos [?].

La descripción matemática de estos procesos estocásticos es fundamental para entender la habilidad de los individuos para explorar su entorno. Hoy en día las nuevas posibilidades de rastreo automatizadas [?] de microorganismos permiten un análisis cuantitativo de un número grande de trayectorias. De esta manera y usando datos experimentales se han podido proponer nuevas ecuaciones de movimiento estocásticas para, por ejemplo, queratinocitos y fibroblastos humanos [?] o amibas *Dictyostelium discoideum* [?].

### 2.1.3. Ecuación de Langevin

Algún tiempo después de la derivación original de Einstein, P. Langevin [?] presentó un nuevo método para abordar el problema del movimiento

browniano. De los resultados de mecánica estadística se sabía que el promedio de la energía cinética de una partícula en equilibrio es

$$\left\langle \frac{1}{2}mv^2 \right\rangle = \frac{1}{2}k_B T. \quad (2.6)$$

Langevin simplificó este modelo tomando en cuenta las contribuciones de dos fuerzas solamente:

- (i) Una fuerza de arrastre viscosa. Para modelarla utilizó los resultados de la hidrodinámica, en donde la fuerza está dada por  $-6\pi\eta a \frac{dx}{dt}$ . En la expresión anterior  $\eta$  representa a la viscosidad y  $a$  es el diámetro de la partícula la cual se supone esférica.
- (ii) Una fuerza fluctuante  $\xi$ , la cual representa los impactos de las moléculas del medio (líquido o gas) sobre la partícula browniana. Se impone también que esta fuerza pueda ser positiva o negativa con igual probabilidad.

De esta manera, Langevin pudo establecer una ecuación de movimiento para la posición de la partícula utilizando la segunda Ley de Newton de la siguiente manera:

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -6\pi\eta a \frac{dx(t)}{dt} + \xi(t). \quad (2.7)$$

Langevin quería obtener una expresión para el coeficiente difusivo en términos de variables termodinámicas [?] y para ello multiplicó por  $x$  a la ecuación (2.7) y la reescribió como

$$\frac{m}{2} \frac{d^2}{dt^2} \langle x^2 \rangle - mv^2 = -3\pi\eta a \frac{d\langle x^2 \rangle}{dt} + \xi x, \quad (2.8)$$

donde se usó que  $v = \frac{dx}{dt}$ . Ahora se calcula el promedio sobre una colectividad grande de partículas y usando (2.6) se obtiene una ecuación diferencial para  $\langle x^2 \rangle$ :

$$\frac{m}{2} \frac{d^2}{dt^2} \langle x^2 \rangle + 3\pi\eta a \frac{d\langle x^2 \rangle}{dt} = k_B T. \quad (2.9)$$

Para llegar a esta ecuación se utilizó que  $\langle \xi x \rangle$  vale cero [?] debido a que la fuerza  $\xi$ , en este caso particular, cumple las siguientes propiedades,

$$\langle \xi(t) \rangle = 0 \quad \text{y} \quad \langle \xi(t) \xi(s) \rangle = \tilde{C} \delta(t - s), \quad (2.10)$$

donde  $\tilde{C}$  es una constante. Uno encuentra que la ecuación (2.9) tiene como primera integral

$$\frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle = \frac{k_B T}{3\pi\eta a} + C e^{-6 \frac{\pi\eta a t}{m}}, \quad (2.11)$$

con  $C$  una constante. En este trabajo Langevin estimó que la exponencial decreciente era despreciable para observaciones experimentales [?]. Entonces se puede volver a integrar en el tiempo y se obtiene:

$$\langle x^2 \rangle - \langle x_0^2 \rangle = \frac{k_B T}{3\pi\eta a} t. \quad (2.12)$$

El resultado anterior corresponde a (2.3), deducido por Einstein [?], si es que se hace la identificación

$$D = \frac{k_B T}{6\pi\eta a}. \quad (2.13)$$

La ecuación (2.7) fue uno de los primeros ejemplos de una ecuación diferencial estocástica. El método de Langevin es directo y, a primera vista, da una manera natural de introducir contribuciones estocásticas a la dinámica.

## 2.2. Ecuación de Fokker–Planck

La Ecuación de Fokker–Planck es una ecuación diferencial para la función de distribución de probabilidad  $P(x, v, t)$ , con la cual se busca obtener una expresión para la distribución de probabilidad misma. Esta función es de suma importancia, ya que con ella se tiene toda la información de la evolución del sistema y se pueden calcular, por ejemplo, los promedios de las observables físicas.

El formalismo de Fokker–Planck y el de Langevin son equivalentes y nos brindan una manera de abordar la descripción de un modelo como lo es el modelo estándar de Langevin [?], que es el siguiente

$$m \frac{dv}{dt} = -6\pi\eta a v + \xi(t) \equiv -\gamma v + \xi(t), \quad (2.14)$$

en términos de probabilidades. La función  $P(x, v, t)$  nos expresa la probabilidad de encontrar a una partícula con una rapidez entre  $v$  y  $v + dv$ , en una posición entre  $x$  y  $x + dx$  a un tiempo  $t$ .

La relación entre la función  $P(x, v, t)$  y las ecuaciones de Langevin (2.14) viene dada por la expresión [?]:

$$P(x, v, t) = \langle \delta(x - x(t)) \delta(v - v(t)) \rangle, \quad (2.15)$$

en donde el promedio está tomado con respecto a una colectividad de trayectorias de partículas [?].

Para obtener la ecuación de Fokker–Planck se utiliza la representación de Fourier de las deltas de Dirac [?]:

$$\begin{aligned} \delta(x - x(t)) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x(t))} dk, \\ \delta(v - v(t)) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{iq(v-v(t))} dq, \end{aligned} \quad (2.16)$$

de tal manera que la ecuación (2.15) se reescribe de la siguiente manera:

$$P(x, v, t) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \int_{-\infty}^{\infty} \langle e^{ik(x-x(t))} e^{iq(v-v(t))} \rangle dq \right) dk. \quad (2.17)$$

Entonces la evolución de la distribución de probabilidad está dada por:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} P(x, v, t) &= \left\langle \int_{-\infty}^{\infty} (-ik\dot{x}(t)) e^{ik(x-x(t))} \delta(v-v(t)) dk + \right. \\
&\quad \left. \int_{-\infty}^{\infty} (-iq\dot{v}(t)) e^{iq(v-v(t))} \delta(x-x(t)) dq \right\rangle \\
&= - \left\langle \frac{\partial}{\partial x} \dot{x}(t) \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x(t))} \delta(v-v(t)) dk + \right. \\
&\quad \left. \frac{\partial}{\partial v} \dot{v}(t) \int_{-\infty}^{\infty} e^{iq(v-v(t))} \delta(x-x(t)) dq \right\rangle \tag{2.18} \\
&= - \left\langle \frac{\partial}{\partial x} v(t) \delta(x-x(t)) \delta(v-v(t)) + \right. \\
&\quad \left. \frac{\partial}{\partial v} \left( -\frac{\gamma}{m} v(t) + \xi(t) \right) \delta(x-x(t)) \delta(v-v(t)) \right\rangle \\
&= - \frac{\partial}{\partial x} v P(x, v, t) + \frac{\gamma}{m} \frac{\partial}{\partial v} v P(x, v, t) \\
&\quad - \frac{\partial}{\partial v} \langle \xi(t) \delta(x-x(t)) \delta(v-v(t)) \rangle.
\end{aligned}$$

Para calcular el tercer término de la ecuación anterior se utiliza el teorema de Novikov [?] y se va a tener que [?]:

$$\frac{1}{D} \langle \xi(t) \delta(x-x(t)) \delta(v-v(t)) \rangle = - \frac{\partial}{\partial v} P(x, v, t). \tag{2.19}$$

Por lo tanto, para la ecuación (2.14), la ecuación de Fokker-Planck resultante es:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, v, t) = - \frac{\partial}{\partial x} v P(x, v, t) + \frac{\gamma}{m} \frac{\partial}{\partial v} v P(x, v, t) + D \frac{\partial^2}{\partial v^2} P(x, v, t), \tag{2.20}$$

donde se ha supuesto la identificación (2.13) [?].

### 2.3. Oblicuidad y curtosis

En los procesos estocásticos, a uno le interesa estudiar las propiedades de las distribuciones de las variables aleatorias, como por ejemplo el desplazamiento cuadrático medio. También es importante saber la simetría que tienen las distribuciones, ya que a veces estas simetrías ahorran el trabajo al momento de calcular observables físicas. Generalmente, uno toma como

punto de partida las propiedades de la distribución normal, ya que éstas son directas de calcular. Por lo tanto es conveniente cuantificar las desviaciones de las distribuciones con respecto a una gaussiana. La manera de estudiar estas diferencias es por medio de los cumulantes de órdenes superiores al segundo. El momento de orden  $m$  de una distribución de probabilidad  $P(x, t)$  se define de la siguiente manera

$$\langle x^m(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^m P(x, t) dx. \quad (2.21)$$

El tercer momento normalizado en una dimensión, también llamado oblicuidad o *skewness*, puede tener valores positivos o negativos. Una oblicuidad negativa indica que la cola en el lado izquierdo o negativo de la densidad de probabilidad es más larga o ancha que la cola del lado derecho. Contrariamente, una oblicuidad positiva indica que la cola del lado derecho o positivo de la densidad de probabilidad es más larga o ancha que la cola del lado izquierdo. Dado que la oblicuidad no distingue la forma de las colas, existen casos donde este parámetro no sirve de mucho, como por ejemplo una distribución donde en un lado la cola sea delgada pero larga y en el otro lo suficientemente ancha para poder balancear y dar como resultado una oblicuidad igual a cero, valor esperado para una distribución simétrica como es el caso de la gaussiana.

La definición de la oblicuidad en una dimensión es la siguiente:

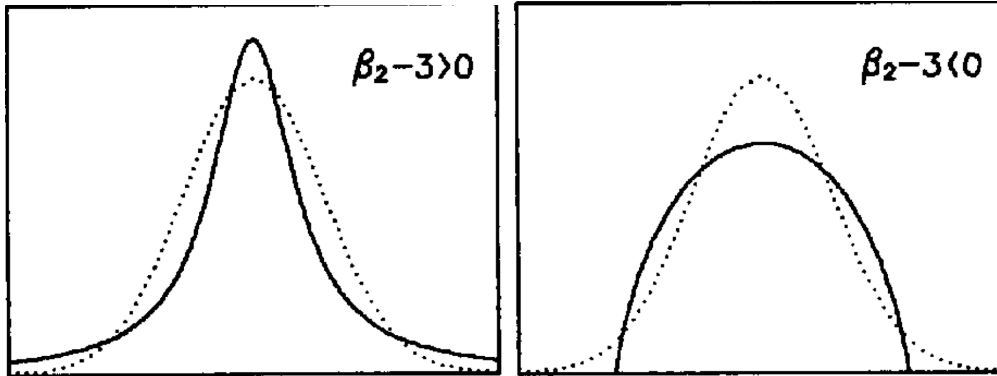
$$\Gamma = \frac{\langle (x - \langle x \rangle)^3 \rangle}{\sigma^3} = \frac{\mu_3}{\sigma^3}. \quad (2.22)$$

La curtosis, por su parte, se define en una dimensión como:

$$k_1 = \frac{\langle (x - \langle x \rangle)^4 \rangle}{\sigma^4} = \frac{\mu_4}{\sigma^4}. \quad (2.23)$$

De la definición es inmediato ver que la curtosis para una distribución normal vale  $k_1 = 3$ . Es por eso que en ocasiones se usa un coeficiente diferente, el cual es el siguiente:

$$k_2 = \frac{\langle (x - \langle x \rangle)^4 \rangle}{\sigma^4} - 3 = \frac{\mu_4}{\sigma^4} - 3. \quad (2.24)$$



(a) Distribución con curtosis positiva comparada con una distribución gaussiana (punteada) [?].  
 (b) Distribución con curtosis negativa comparada también con una distribución gaussiana (punteada) [?].

Figura 2.3: Distribuciones con curtosis positiva y negativa.

De esta manera se logra que el nuevo coeficiente de curtosis valga  $k_2 = 0$ . La curtosis es una medida de la forma de la distribución y da información sobre la proporción de la varianza. Una distribución con colas pesadas y picos altos va a tener una curtosis positiva, mientras que una con colas ligeras y un pico plano va a tener una curtosis negativa. Esto se puede ver en la Figura 2.3.

Existen distribuciones como la bimodal, cuya curtosis no entra en la descripción anterior. Pero ya que este tipo de distribuciones no aparecen en nuestro trabajo, no hace falta profundizar más al respecto.

Generalizaciones a distribuciones en dos dimensiones de las definiciones (2.22) y (2.23) las proporciona Mardia [?] y resultan ser:

$$\Gamma = \left\langle [(\mathbf{x} - \langle \mathbf{x} \rangle) \Sigma^{-1} (\mathbf{y} - \langle \mathbf{y} \rangle)^T]^3 \right\rangle \quad (2.25)$$

$$\kappa = \left\langle [(\mathbf{x} - \langle \mathbf{x} \rangle) \Sigma^{-1} (\mathbf{x} - \langle \mathbf{x} \rangle)^T]^2 \right\rangle \quad (2.26)$$

en donde  $\mathbf{x}^T$  y  $\mathbf{y}$  son, respectivamente, el vector transpuesto y un vector independiente e idénticamente distribuido a  $\mathbf{x} = (x, y)$ , el vector posición. Por su parte,  $\Sigma^{-1}$  es la inversa de la matriz definida por el promedio del producto diádico entre  $(\mathbf{x} - \langle \mathbf{x} \rangle)^T$  y  $(\mathbf{x} - \langle \mathbf{x} \rangle)$  y cuya expresión explícita es:

$$\begin{aligned}\Sigma^{-1} &= \left\langle \left( \begin{array}{cc} x^2 & xy \\ xy & y^2 \end{array} \right) \right\rangle^{-1} = \begin{pmatrix} \langle x^2 \rangle & \langle xy \rangle \\ \langle xy \rangle & \langle y^2 \rangle \end{pmatrix}^{-1} \\ &= \frac{1}{\langle x^2 \rangle \langle y^2 \rangle - \langle xy \rangle^2} \begin{pmatrix} \langle y^2 \rangle & -\langle xy \rangle \\ -\langle xy \rangle & \langle x^2 \rangle \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Para distribuciones en dos dimensiones con independencia angular, la matriz  $\Sigma^{-1}$  es diagonal y el promedio de potencias impares de  $\mathbf{x}$  se hace cero. De esta manera, la oblicuidad de distribuciones con independencia angular vale

$$\Gamma = 0. \quad (2.27)$$

La curtosis, por otro lado, no es cero para distribuciones del mismo tipo. Como se explicó anteriormente, conviene calcular la curtosis de una distribución normal para ser tomada como una referencia. Tomemos una gaussiana normalizada particularmente sencilla, cuya expresión es

$$f(x, y) = \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y} e^{-\left(\frac{x^2}{2\sigma_x^2} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right)}. \quad (2.28)$$

Para poder simplificar los cálculos, la expresión de la curtosis generalizada por Mardia se puede escribir explícitamente como:

$$\begin{aligned}\kappa &= \left( \frac{1}{\langle x^2 \rangle \langle y^2 \rangle - \langle xy \rangle^2} \right)^2 \left( \langle x^4 \rangle \langle y^2 \rangle^2 + \langle y^4 \rangle \langle x^2 \rangle^2 + 2\langle x^2 y^2 \rangle \langle y^2 \rangle \langle x^2 \rangle \right. \\ &\quad \left. - 4\langle x^3 y \rangle \langle y^2 \rangle \langle xy \rangle - 4\langle y^3 x \rangle \langle x^2 \rangle \langle xy \rangle + 4\langle x^2 y^2 \rangle \langle xy \rangle^2 \right).\end{aligned} \quad (2.29)$$

Para poder calcular (2.29) para la distribución (2.28) hay que calcular por separado los términos pares de la expresión de la curtosis, ya que los términos impares son cero. Los términos son fáciles de calcular:



$$\begin{aligned}
\langle x^4 \rangle &= \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} dx dy = 3\sigma_x^4 \\
\langle y^4 \rangle &= \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} y^4 e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} dx dy = 3\sigma_y^4 \\
\langle x^2 y^2 \rangle &= \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 y^2 e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} dx dy = \sigma_x^2 \sigma_y^2 \\
\langle x^2 \rangle &= \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} dx dy = \sigma_x^2 \\
\langle y^2 \rangle &= \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} y^2 e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} dx dy = \sigma_y^2 \\
\langle x^3 y \rangle &= \langle y^3 x \rangle = \langle xy \rangle = 0.
\end{aligned} \tag{2.30}$$

Una vez con los valores de los términos en (2.30), se puede calcular la curtosis y da el siguiente valor:

$$\kappa_{\text{Gauss}} = \left( \frac{1}{\sigma_x^2 \sigma_y^2} \right)^2 \left( 3\sigma_x^4 \sigma_y^4 + 3\sigma_x^4 \sigma_y^4 + 2\sigma_x^2 \sigma_y^2 \sigma_x^2 \sigma_y^2 \right) = 8. \tag{2.31}$$

En esta sección se calculó la curtosis para una distribución normal particularmente sencilla, como lo es (2.28) ya que es precisamente esta distribución la que caracteriza la evolución temporal a tiempos largos en nuestro problema y es con la cual queremos comparar nuestros resultados. Se podría calcular la curtosis para una distribución normal más general, por ejemplo una que no tenga simetría angular como (2.28), y lo que pasaría es que los términos de correlación no se harían cero y la matriz  $\Sigma^{-1}$  no sería diagonal. Pero se podría encontrar una transformación tal que la llevara a una distribución como la estudiada aquí y esta transformación traería consigo coeficientes que podrían modificar el valor de la curtosis.

En este caso, se podría hacer algo análogo a la curtosis en una dimensión y redefinir una nueva curtosis como la que está en la definición de la referencia [?] menos 8, pero para fines prácticos no lo haremos nosotros en este trabajo.

## 2.4. Modelos de partículas autopropulsadas

El estudio de las propiedades de transporte de partículas activas, es decir partículas autopropulsadas, ha sido de gran interés a lo largo de las dos últimas décadas [?, ?]. La autopropulsión como característica de sistemas fuera

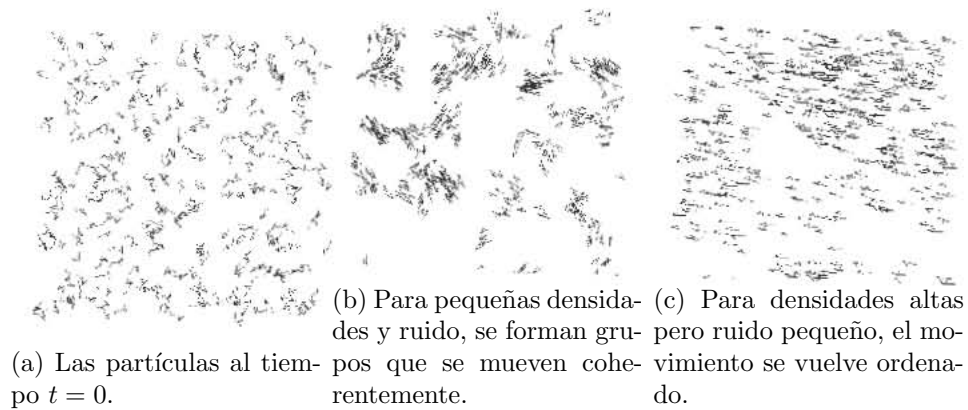


Figura 2.4: Dinámica de partículas con interacción de alineamiento, como las estudió Vicsek et al. [?]. La velocidad de la partícula está dada por una pequeña flecha y la trayectoria en los últimos 20 pasos de tiempo está denotada por una línea continua.

de equilibrio ha sido utilizada para describir sistemas muy diversos, como por ejemplo: forrajeo de organismos en problemas de ecología [?, ?], el movimiento de bacterias [?] y la dinámica de fotones en medios dispersivos [?, ?, ?].

El modelo más sencillo de autopropulsión es considerar que las partículas tienen rapidez constante. Aproximaciones a este modelo se han estudiado experimentalmente [?, ?, ?, ?, ?] y se han usado para estudiar diferentes sistemas que exhiben movimiento colectivo en partículas con interacción [?] (Figura 2.4), difusión anómala para cuando las partículas se mueven en medios heterogéneos [?] (Figura 2.5) o persistencia en el movimiento en partículas que experimentan torcas fluctuantes [?, ?, ?].

## 2.5. Modelos matemáticos de partículas autopropulsadas

### 2.5.1. Fricción no lineal

Como se ha visto en las secciones anteriores, el movimiento browniano denota el movimiento errático de partículas pequeñas (no tan pequeñas como las moléculas) en un medio; por ejemplo un gas o un líquido. Este tipo de movimiento se puede considerar como un movimiento pasivo, ya que la partícula browniana no juega un rol activo en el movimiento [?]. La partícula

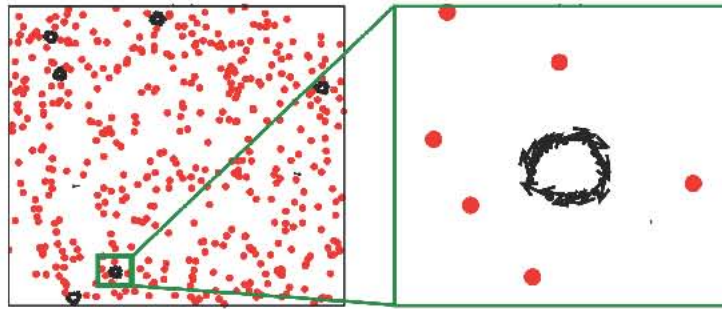


Figura 2.5: Partículas activas en un medio con densidad de obstáculos  $\rho_0$ , denotados por puntos rojos en la figura. Si la velocidad de evasión  $\gamma$  de las partículas y la densidad de obstáculos del medio son altas, ocurre un atrapamiento de las partículas como se muestra en esta figura, reportada en el trabajo de Chepizhko y Peruani [?].

continúa moviéndose durante la evolución temporal debido a que la disipación de energía se ve compensada con la fuerza estocástica, como lo expresa el Teorema de Fluctuación-Disipación (Relación de Einstein) [?].

Este tipo de movimiento se puede modelar cuando, por ejemplo, se introduce un mecanismo que convierte energía del medio en energía cinética de las partículas. Una manera de hacerlo es utilizar un coeficiente de fricción complejo que pueda depender de la posición y/o la velocidad y el cual también puede tener valores negativos [?]. Fricción negativa está presente en sistemas en donde las partículas pierden energía en su movimiento y la cual se ve compensada por una fuente mecánica o estocástica de energía.

Si el flujo de energía sobrepasa un cierto límite, el movimiento de las partículas puede pasar de ser pasivo a activo [?]. Movimiento activo es de interés en sistemas físico-químicos o biológicos y los modelos recientes prefieren enfocarse en la interacción de partículas en vez de hacer un estudio en términos de energía.

Un ejemplo de fricción no lineal lo han trabajado en el grupo de U. Erdmann y L. Schimansky-Geier en la universidad de Berlin [?]. Este modelo utiliza un formalismo de Langevin y sigue las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{x}}{dt} &= \mathbf{v} \\ \frac{d\mathbf{v}}{dt} &= -\gamma(\mathbf{v})\mathbf{v} - \frac{1}{m}\nabla U(\mathbf{x}) + \xi(t),\end{aligned}\tag{2.32}$$

en donde  $\gamma(\mathbf{v})$  es el coeficiente de fricción,  $U(\mathbf{x})$  es un potencial externo y  $\xi(t)$  es una fuerza estocástica con intensidad  $D$ . La ecuación de Fokker-Planck correspondiente resulta ser:

$$\begin{aligned}\frac{\partial P(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left( \gamma(\mathbf{v})\mathbf{v}P(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) + D\frac{\partial P(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)}{\partial \mathbf{v}} \right) \\ &\quad - \mathbf{v}\frac{\partial P(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)}{\partial \mathbf{x}} + \frac{1}{m}\nabla U(\mathbf{x})\frac{\partial P(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)}{\partial \mathbf{v}}.\end{aligned}\tag{2.33}$$

La función  $\gamma(\mathbf{v})$  que utilizan para lograr tener partículas autopropulsadas está visualizada en la Figura 2.6.

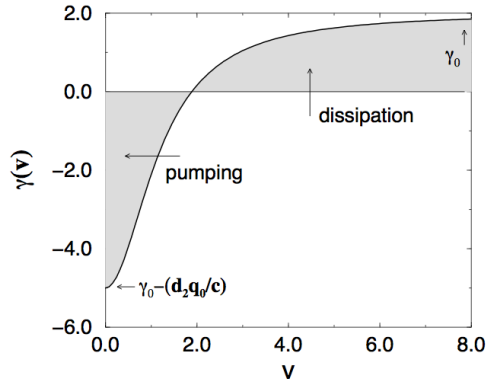


Figura 2.6: Ejemplo de fricción no lineal  $\gamma(\mathbf{v})$  [?].

En esta Figura 2.6 se puede observar que existe una región donde el coeficiente  $\gamma(\mathbf{v})$  es negativo (velocidades bajas), y en la región de velocidades altas el coeficiente se vuelve positivo. De esta manera si la partícula tiene una velocidad baja, la fricción negativa hará que ésta aumente. De igual manera, si la velocidad de la partícula es alta, la fricción positiva tendrá un efecto de amortiguamiento y así se desacelerarán los agentes activos.

El sistema físico se vuelve más interesante cuando se considera un potencial externo de la forma:

$$U(x_1, x_2) = \frac{1}{2}a(x_1^2 + x_2^2) \quad (2.34)$$

con  $a$  una constante con unidades de masa  $\times$  [tiempo] $^{-2}$ . En este caso aparecen ciclos límite en el espacio fase, como se muestra en la Figura 2.7.

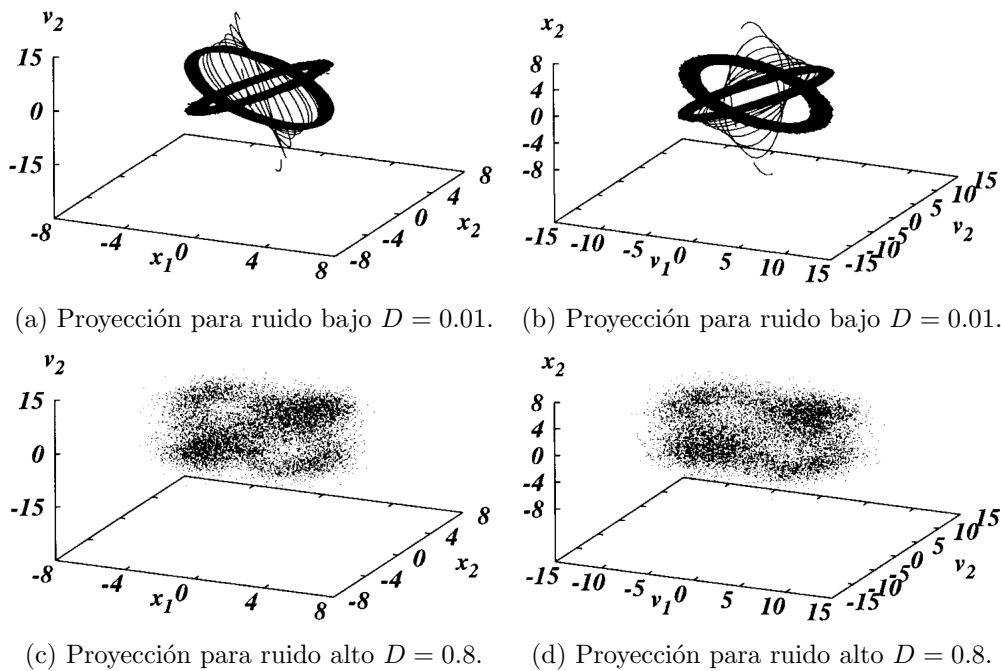


Figura 2.7: Proyecciones de una trayectoria estocástica en el espacio fase tridimensional  $(x_1, x_2, v_2)$  para las figuras (a) y (c),  $(v_1, v_2, x_2)$  para las figuras (b) y (d) [?].

Este tipo de modelos se utilizan para describir el movimiento de, por ejemplo, moléculas activas [?].

### 2.5.2. Modelos de depósitos internos de energía

En otro trabajo de este mismo grupo de la Universidad de Berlin se aborda un sistema parecido, en donde las partículas brownianas poseen la habilidad de tomar energía del medio para almacenarla en un depósito interno y convertirla en energía cinética [?]. Se ha utilizado este trabajo para modelar la

movilidad de animales [?].

En este esquema, las partículas pierden energía que es absorbida por los alrededores, pero esta pérdida se ve compensada por la capacidad de las mismas de tomar energía en lugares definidos del plano. Ésta es una diferencia con respecto a las partículas brownianas usuales, las cuales la obtienen de fluctuaciones térmicas. El almacenaje de energía, modelado por la función denominada  $e(t)$ , se puede ver afectado de tres maneras:

- (i) Flujo de energía de los alrededores, modelado por una función  $q(\mathbf{r})$ .
- (ii) Disipación interna de energía, la cual se supone constante ( $c$ ) y proporcional a la energía almacenada.
- (iii) Conversión de energía interna en energía cinética, en donde  $d(\mathbf{v})$  es la tasa de conversión. En este modelo se utiliza que

$$d(\mathbf{v}) = d_2 v^2, \quad (2.35)$$

con  $d_2$  una constante positiva:  $d_2 > 0$ .

Se establece primero una ecuación de balance de energías de la forma

$$\frac{d}{dt}e(t) = q(\mathbf{r}) - ce(t) - d_2 v^2(t)e(t). \quad (2.36)$$

La ecuación de Langevin que resulta en este sistema es

$$m\dot{\mathbf{v}} + \gamma\mathbf{v} + \nabla U(\mathbf{r}) = d_2 e(t)\mathbf{v} + \sqrt{2D}\boldsymbol{\xi}(t). \quad (2.37)$$

De esta manera se obtiene una ecuación tipo Langevin, para así seguir trabajando y analizando el sistema.

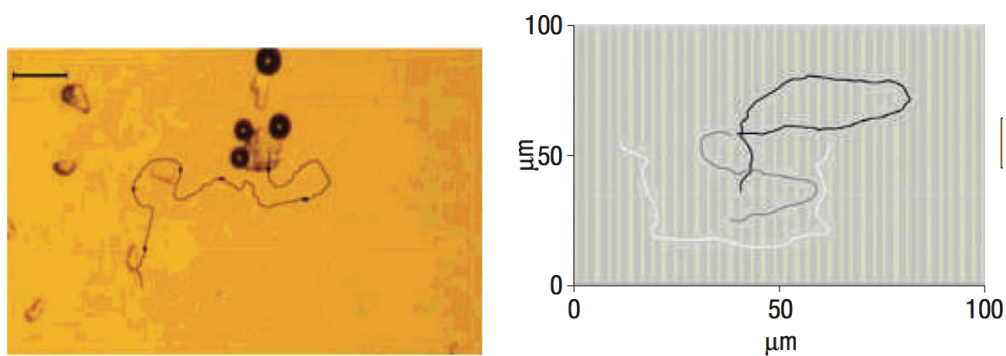
### 2.5.3. Motores moleculares

Con toda la herramienta ya discutida previamente, uno se podría preguntar si existe la tecnología no sólo para describir sistemas activos, sino también para controlarlos. Es decir, las preguntas que surgen serían ¿se puede controlar el movimiento de partículas activas? ¿Se pueden fabricar estos agentes o tienen que ser partículas de origen biológico? Al respecto se conoce bastante y se han hecho avances significativos [?]: se sabe que los motores

## 2.5. MODELOS MATEMÁTICOS DE PARTÍCULAS AUTOPROPULSADAS 23

biológicos convierten energía química para efectuar movimiento lineal o rotacional y son responsables de una amplia gama de funciones biológicas [?]. Las proteínas, que pueden ser vistas como motores biológicos con movimiento lineal, son responsables de procesos tan importantes como la contracción muscular, transporte intracelular, síntesis del ATP [?], etc. Otros ejemplos fascinantes incluyen a las proteínas de las membranas que son responsables de la translocación de sustancias, los flagelos que permiten la movilidad de bacterias y proteínas que pueden atrapar sustancias a través de movimiento quimio-mecánico.

En los años recientes, se han hecho muchos avances en la fabricación de motores biomoleculares con miras a la construcción de sensores y transportadores biológicos [?]. Pero se ha visto que, aún cuando estos motores hechos por la naturaleza son capaces de funciones complejas e intrincadas, tienen una desventaja muy grande: su aplicación y utilización *ex vivo* tiene muchas inestabilidades y restricciones ya que estos mecanismos están fuera del alcance de la nanotecnología actual. En contraste los sistemas totalmente sintéticos ofrecen ventajas considerables, ya que pueden soportar un rango más amplio de condiciones. Un ejemplo es el sistema de partículas metálicas descrito en [?]. Este sistema está formado por partículas inmersas en un medio líquido capaces de catalizar la descomposición de peróxido de hidrógeno (el combustible químico de estas partículas) para así generar un gradiente de oxígeno en el medio que se traduce en un gradiente en la tensión superficial del líquido, lo que estimula el movimiento de las partículas metálicas con un control direccional. Estas partículas se pueden apreciar en la Figura 2.8.



(a) Partículas metálicas autopropulsadas por medio de descomposición de  $H_2O_2$  a  $H_2O$  y  $O_2$  [?]. (b) Trayectorias de las partículas metálicas en una escala micrométrica controladas de tal manera que forman las letras PSU [?].

Figura 2.8: Partículas activas hechas por el hombre.

De este modo se ha podido comprobar que la teoría de partículas activas tiene diversas aplicaciones en el área de la biología, química y tecnología [?].

## 2.6. Sistemas discretos de caminantes aleatorios persistentes

Problemas relacionados con el transporte de materia en medios desordenados son comunes en muchas áreas de la ciencia y tecnología. Por lo mismo, se ha hecho mucha investigación en esta rama de la física. Un grupo de investigadores en Barcelona y Maryland, encabezados por Jaume Masoliver y George H. Weiss trabajaron el problema de transporte de partículas persistentes con rapidez constante en dos dimensiones. Como se sabe bien, las soluciones analíticas son escasas en problemas de este tipo, y más aún en dimensiones espaciales mayores a uno.

La ecuación de difusión es el modelo más sencillo que aproxima a la ecuación de transporte y es adecuado en muchas aplicaciones. Esta aproximación es adecuada para tiempos largos, donde el teorema de límite central es equivalente a la aproximación difusiva. Aún cuando la solución a la ecuación de difusión no es una solución exacta, es muy atractiva ya que se conoce su expresión analítica.

La propuesta de utilizar a la ecuación del telegrafista como una mejor aproximación al problema de transporte fue hecha por Ishimaru en el contexto de la óptica [?]. Ahí se reemplaza la ecuación de difusión por la ecuación del telegrafista:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}P + \gamma \frac{\partial}{\partial t}P = \frac{v_0^2}{2} \nabla^2 P, \quad (2.38)$$

con  $\gamma$  un parámetro con dimensiones de  $[\text{tiempo}]^{-1}$  y  $v_0$  una velocidad.

En su trabajo [?], Masoliver y Weiss investigan precisamente si esta ecuación del telegrafista es en verdad una mejor aproximación al problema de transporte que la ecuación de difusión para un sistema de caminantes aleatorios persistentes con rapidez constante en dos dimensiones.

La ecuación de transporte estudiada es la siguiente:



$$\frac{\partial}{\partial t}P(\mathbf{x}, \varphi, t) = -(\lambda + \mu)P(\mathbf{x}, \varphi, t) - v(\varphi)\nabla P(\mathbf{x}, \varphi, t) + \lambda \int P(\mathbf{x}, \varphi', t)\beta(\varphi|\varphi')d\varphi', \quad (2.39)$$

en donde  $\lambda$  es el parámetro de dispersión,  $\mu$  modela la absorción del medio y  $\beta$  es el kernel de dispersión, es decir,  $\beta(\varphi|\varphi')d\varphi'$  es la probabilidad de que el ángulo de una partícula cambie de  $\varphi'$  a un ángulo entre  $\varphi$  y  $\varphi + d\varphi$ .

Al estudiar el problema modelado por (2.39) en una dimensión espacial, se dan cuenta que la partícula se puede mover solamente en dos direcciones. Para describir el problema utilizan las probabilidades de estar en una posición entre  $x$  y  $dx$  a un tiempo  $t$  con velocidad  $\pm v$ :  $p_{\pm 1}(x, t)$ . Si se olvidan de la información sobre la velocidad, llegan a que la ecuación del telegrafista da una solución exacta, no aproximada, al problema en una dimensión.

Al intentar generalizar este resultado a espacios de dos dimensiones espaciales se dan cuenta que la solución a la ecuación del telegrafista no se puede considerar como una densidad de probabilidad. Para notar esto, comparan tres soluciones: la solución a la ecuación antes mencionada, la solución de la ecuación de difusión y una solución que ellos llaman exacta. Las soluciones vienen dadas por:

$$P_{\text{Telegrafista}}(r, t) = \frac{\gamma e^{-\frac{\gamma t}{2}}}{2^{\frac{2}{3}}\pi v_0 \sqrt{\frac{v_0^2 t^2}{2} - r^2}} \left( \cosh \alpha + \frac{\gamma t \sinh \alpha}{2\alpha} \right) H\left(\frac{v_0 t}{\sqrt{2}} - r\right) + \frac{e^{-\frac{\gamma t}{2}}}{\pi \sqrt{2} v_0} \cosh \alpha \frac{\partial}{\partial t} \left[ \frac{H\left(\frac{v_0 t}{\sqrt{2}} - r\right)}{\sqrt{\frac{v_0^2 t^2}{2} - r^2}} \right], \quad (2.40)$$

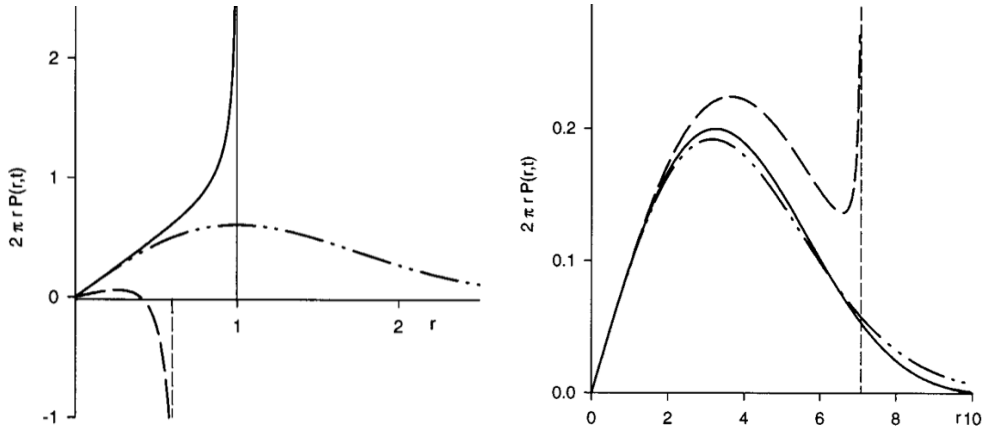
$$P_{\text{Exacta}}(r, t) = e^{-\gamma t} \left[ \frac{\delta(r - v_0 t)}{2\pi r} + \frac{\gamma}{2\pi v_0 \sqrt{v_0^2 t^2 - r^2}} + \exp\left(\frac{\gamma \sqrt{v_0^2 t^2 - r^2}}{v_0}\right) H(v_0 t - r) \right], \quad (2.41)$$

$$P_{\text{Dif}}(r, t) = \frac{\gamma}{2v_0^2 \pi t} \exp\left(-\frac{\gamma r^2}{2v_0^2 t}\right), \quad (2.42)$$

en donde  $\alpha = \frac{\gamma}{v_0\sqrt{2}}\sqrt{\frac{v_0^2 t^2}{2} - r^2}$ ,  $r = |\mathbf{x}|$  y  $H(x)$  es la función escalón de Heaviside.

Las gráficas de estas tres funciones se pueden apreciar en las Figuras 2.9a y 2.9b. El resultado más importante está dado en el régimen de tiempos cortos, donde se puede apreciar que la función (2.40) toma valores negativos. Por lo tanto, no se puede considerar como una distribución de probabilidad adecuada excepto para regímenes de tiempos largos. Para este segundo régimen se puede apreciar en la Figura (2.9b) que la solución a la ecuación del telegrafista tiene solamente valores positivos, pero aún así, la solución a la ecuación de difusión (2.42) es una mejor aproximación al problema.

En la Figura 2.9b se aprecia una divergencia de la solución  $P_{\text{Telegrafista}}(r, t)$  en  $r = vt/\sqrt{2}$ . En [?] se argumenta que esta se debe a que se utilizó la condición inicial  $P(\mathbf{x}, 0) = \delta(\mathbf{x})$ , pero se observa que la divergencia es integrable y  $P_{\text{Telegrafista}}(\mathbf{x}, t)$  está normalizada a uno.



(a) Distribuciones al tiempo  $t = 1$  [?].

(b) Distribuciones al tiempo  $t = 10$  [?].

Figura 2.9: Probabilidad radial de las distribuciones en dos dimensiones.  $2\pi r P_{\text{Exacta}}(r, t)$  es la línea sólida,  $2\pi r P_{\text{Telegrafista}}(r, t)$  es la línea a rayas, y  $2\pi r P_{\text{Dif}}(r, t)$  es la línea a rayas y puntos. Ambas gráficas se obtuvieron con los valores  $\gamma = v_0 = 1$ .

Cabe mencionar que este trabajo fue nuestro punto de partida y motivación para proponer un modelo de agentes activos con rapidez constante y así encontrar una solución que generaliza la ecuación del telegrafista a dos dimensiones.

## 2.7. Trabajos en espacios discretos

En la sección pasada se plantearon los problemas de la generalización de la ecuación del telegrafista a dos dimensiones, pero a pesar de esto se han hecho intentos por obtener una descripción alternativa del sistema de partículas con rapidez constante en dos dimensiones.

Boguñá [?] también describe un sistema de caminantes aleatorios persistentes sin interacción (*persistent random walkers* PRW) en  $d$  dimensiones, pero abordado de una manera diferente a la que nosotros abordaremos el problema. Este tipo de sistemas son las más simples generalizaciones de caminantes aleatorios que incorporan un tipo de momento sumado al movimiento aleatorio. El modelo de un caminante aleatorio persistente difiere del de un caminante aleatorio ordinario en que el primero toma en cuenta la dirección de movimiento del paso anterior en el tiempo y el segundo no. En redes de dimensión  $d = 1$ , se vuelve a encontrar que la ecuación que describe al sistema es la ecuación del telegrafista [?].

Boguñá menciona que la generalización a dimensiones mayores a 1 es difícil, ya que depende mucho del tipo de red que se esté usando. Hay redes hexagonales, cúbicas, etc . . . Una visualización de este tipo de redes en el caso de tres dimensiones se aprecia en la Figura 2.10.

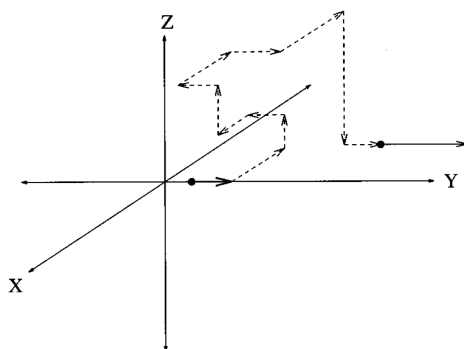


Figura 2.10: Caminante aleatorio persistente confinado en una red cúbica en tres dimensiones [?].

En aquel trabajo [?] los caminantes aleatorios persistentes están condicionados a moverse en una red cúbica en  $d$  dimensiones. La distancia entre nodos es  $l$ , y los intervalos temporales se denotan por  $\tau$ . En cada nodo el caminante

tiene  $2d$  direcciones posibles de movimiento y se utilizan tres probabilidades para describir el movimiento:

- (i) La probabilidad de seguir en la misma dirección que el paso anterior (*forward scattering*).
- (ii) La probabilidad de invertir la dirección de movimiento con respecto al paso anterior (*backward scattering*).
- (iii) La probabilidad de moverse en las otras  $2(d - 1)$  direcciones.

Las probabilidades de que estos eventos ocurran se denotan por  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\gamma$ , respectivamente. Como no se considera absorción en este modelo, las probabilidades satisfacen la condición de normalización [?]:

$$\alpha + \beta + 2(d - 1)\gamma = 1. \quad (2.43)$$

Se definen probabilidades auxiliares  $P_n^{(\pm k)}(i_1, \dots, i_d)$ , que son la probabilidad de que el caminante llegue al nodo  $(i_1, \dots, i_d)$  en la red al paso  $n$  y moviéndose en dirección  $\pm k$ . Las ecuaciones maestras resultantes del modelo son las siguientes [?]:

$$\begin{aligned} P_{n+1}^{(+k)}(i_1, \dots, i_d) &= \alpha P_n^{(+k)}(i_1, \dots, i_k - 1, \dots, i_d) + \beta P_n^{(-k)}(i_1, \dots, i_k - 1, \dots, i_d) \\ &+ \gamma \sum_{j \neq k} [P_n^{(+j)}(i_1, \dots, i_k - 1, \dots, i_d) + P_n^{(-j)}(i_1, \dots, i_k - 1, \dots, i_d)], \\ P_{n+1}^{(-k)}(i_1, \dots, i_d) &= \beta P_n^{(+k)}(i_1, \dots, i_k + 1, \dots, i_d) + \alpha P_n^{(-k)}(i_1, \dots, i_k + 1, \dots, i_d) \\ &+ \gamma \sum_{j \neq k} [P_n^{(+j)}(i_1, \dots, i_k + 1, \dots, i_d) + P_n^{(-j)}(i_1, \dots, i_k + 1, \dots, i_d)]. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Hay que notar que las ecuaciones (2.44) se obtuvieron partiendo de un movimiento discreto de los caminantes, confinados en la red. Al hacer el límite del intervalo espacial  $l \rightarrow 0$  y el intervalo temporal  $\tau \rightarrow 0$ , de tal manera que la velocidad  $v$  se mantenga finita, se obtiene un límite al continuo:

$$v = \lim_{l, \tau \rightarrow 0} \frac{l}{\tau}. \quad (2.45)$$

Al aplicar (2.45) a (2.44) se obtienen las ecuaciones [?]:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial P^{(+k)}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= -v \frac{\partial P^{(+k)}(\mathbf{r}, t)}{\partial x_k} - \lambda P^{(+k)}(\mathbf{r}, t) + cP^{(-k)}(\mathbf{r}, t) \\
&\quad + \frac{1}{2}a \sum_{j \neq k} [P^{(+j)}(\mathbf{r}, t) + P^{(-j)}(\mathbf{r}, t)], \\
\frac{\partial P^{(-k)}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= v \frac{\partial P^{(-k)}(\mathbf{r}, t)}{\partial x_k} - \lambda P^{(-k)}(\mathbf{r}, t) + cP^{(+k)}(\mathbf{r}, t) \\
&\quad + \frac{1}{2}a \sum_{j \neq k} [P^{(+j)}(\mathbf{r}, t) + P^{(-j)}(\mathbf{r}, t)].
\end{aligned} \tag{2.46}$$

en donde  $\lambda$  es la frecuencia promedio con la cual el caminante cambia de dirección y tiene unidades de  $[T]^{-1}$ ,  $\frac{c}{\lambda}$  es la probabilidad de invertir la dirección de movimiento y  $\frac{a}{2\lambda}$  es la probabilidad que el caminante cambie de dirección ortogonalmente.

Si uno se olvida de la información sobre la dirección y quiere hacer una descripción en términos de la posición y el tiempo, se tiene que calcular:

$$P(\mathbf{r}, t) = \sum_{k=1}^d [P^{(+k)}(\mathbf{r}, t) + P^{(-k)}(\mathbf{r}, t)]. \tag{2.47}$$

Para dimensiones con  $d \geq 2$ , la ecuación de evolución para la distribución de probabilidad que se obtiene es la siguiente [?]:

$$\begin{aligned}
&\left[ \partial_t (\partial_t + b)^d (\partial_t + ad)^{d-1} - (\partial_t + b)^{d-1} \right. \\
&\quad \left. \times (\partial_t + ad)^{d-2} (\partial_t + a) v^2 \nabla^2 - \Phi_d \right] P(\mathbf{r}, t) = 0,
\end{aligned} \tag{2.48}$$

en donde  $\Phi_d$  es un operador incluyendo derivadas parciales espaciales de cuarto orden y mayores y  $b = \lambda + c$ . Para dos y tres dimensiones este operador tiene las siguientes expresiones [?]:

$$\begin{aligned}
\Phi_2 &= -v^4 \partial_{x^2 y^2}^4 \\
\Phi_3 &= v^6 \partial_{x^2 y^2 z^2}^6 - v^4 (\partial_t + b) (\partial_t + 2a) (\partial_{x^2 y^2}^4 + \partial_{x^2 z^2}^4 + \partial_{y^2 z^2}^4)
\end{aligned} \tag{2.49}$$

Como podemos ver de las ecuaciones (2.48) y (2.49), la ecuación de evolución de la distribución de probabilidad que resulta es una ecuación diferencial de

orden muy alto en el espacio y en el tiempo, en la cual, desde nuestro punto de vista, se puede llegar a perder la intuición física de la solución. Esta noción a la que nos referimos es básicamente a la forma de la ecuación, ya que no es fácil identificar, por ejemplo, cuáles son los términos cinéticos, etc. Además es difícil compararla con otras ecuaciones físicas bien conocidas y estudiadas como lo es la ecuación de onda o la ecuación de difusión. Nuestra hipótesis es que el origen de estas ecuaciones diferenciales de orden mayor está en abordar el problema de una manera discreta.

De esta manera queda claro que derivar una ecuación de transporte apropiada para la densidad de probabilidad en dimensiones mayores a uno ha sido un problema central [?, ?, ?, ?].

# 3

## Partículas con rapidez constante

En este capítulo se va a introducir un modelo de partículas autopropulsadas con rapidez constante en dos dimensiones. Se plantearán las ecuaciones de Langevin para después poder encontrar la ecuación de Fokker–Planck del modelo. En seguida se darán dos aproximaciones a la solución  $P(\mathbf{x}, t)$  de la ecuación antes mencionada. La aproximación a tiempos largos resulta ser la solución a la ecuación del telegrafista en dos dimensiones y la segunda resulta ser una generalización de la solución a la ecuación del telegrafista, en donde aparecen términos de memoria. La primera aproximación se ha estudiado en trabajos como [?], y la segunda aproximación es el aporte de la tesis.

### 3.1. Ecuaciones de Langevin para agentes brownianos con rapidez constante

En este modelo se quiere describir la dinámica de partículas autopropulsadas con rapidez constante, es decir  $|\mathbf{v}| = v_0 = \text{cte.}$ , sin interacción. Es por eso que basta con determinar el estado de una partícula y para ello es necesario saber su posición  $\mathbf{x}$  y su velocidad  $\mathbf{v}$ , dada en este caso por un vector en dos dimensiones con magnitud constante. La manera de introducir estocasticidad al sistema es modelar que la partícula cambia su dirección en forma aleatoria. Esto se modela con las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} &= v_0 \hat{\mathbf{v}}(t) \\ \frac{d\varphi(t)}{dt} &= \xi_\varphi(t) \end{aligned} \tag{3.1}$$

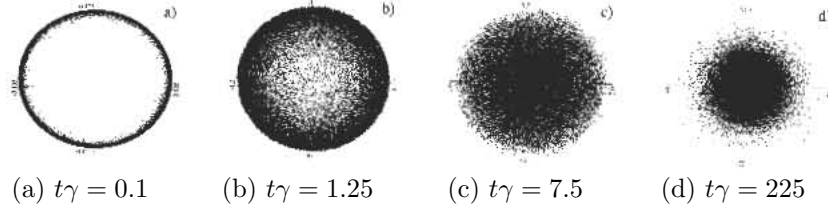


Figura 3.1: Imágenes tomadas de datos obtenidos de un programa escrito en Java para los tiempos: (a)  $t\gamma = 0.1$  y una curtosis  $\kappa = 4.003$ , (b)  $t\gamma = 1.25$  y una curtosis  $\kappa = 4.33$ , (c)  $t\gamma = 7.5$  y una curtosis  $\kappa = 6.352$ , (d)  $t\gamma = 225$  y una curtosis  $\kappa = 7.938$ . Hay que notar que los ejes han sido reescalados para poder observar bien toda la distribución.

en donde el vector unitario de velocidad  $\hat{\mathbf{v}}(t)$  está dado por  $(\cos \varphi(t), \sin \varphi(t))$  y el ángulo  $\varphi(t)$  el ángulo del mismo. Estas ecuaciones modelan el movimiento browniano de una partícula que cambia su dirección de movimiento de acuerdo a una variable estocástica llamada  $\xi_\varphi(t)$ . En este modelo se utilizará que esta variable es ruido blanco, es decir, que tiene las siguientes propiedades:

$$\begin{aligned} \langle \xi_\varphi(t) \rangle &= 0 \\ \langle \xi_\varphi(t) \xi_\varphi(s) \rangle &= 2\gamma \delta(t - s) \end{aligned} \quad (3.2)$$

en donde  $\gamma$  es una constante con unidades de  $[\text{tiempo}]^{-1}$  y denota la intensidad del ruido.

Para poder visualizar los resultados y el comportamiento físico de las partículas autopropulsadas de nuestro modelo se realizó un programa en java. En éste se visualizaban las trayectorias de 100000 partículas y se obtuvieron resultados como los presentados en la Figura 3.1.

Si queremos describir al sistema a la manera de Einstein, hay que hacer uso de la probabilidad  $P(\mathbf{x}, \varphi, t) d^2\mathbf{x} d\varphi$  de encontrar a una partícula en una posición en un elemento de volumen  $d^2\mathbf{x}$  centrado en  $\mathbf{x}$ , con un ángulo entre  $\varphi$  y  $\varphi + d\varphi$  a un tiempo  $t$ , ya que se trata de un sistema que involucra variables aleatorias y por lo tanto podemos hablar de promedios únicamente.

## 3.2. Ecuación de Fokker–Planck

Las ecuaciones (3.1) dan la descripción de los agentes brownianos autopropulsados. El siguiente paso es obtener la distribución  $P(\mathbf{x}, \varphi, t)$  y la



conexión entre el modelo y esta función de probabilidad se hace a través de un ensamble o colectividad de trayectorias de una partícula de la siguiente manera:

$$P(\mathbf{x}, \varphi, t) = \langle \delta^{(2)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}(t)) \delta(\varphi - \varphi(t)) \rangle, \quad (3.3)$$

Para poder calcular (3.3) se tiene que reescribir la función delta de Dirac en su representación integral:

$$\begin{aligned} \delta^{(2)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}(t)) &= \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik_x(x-x(t))} e^{ik_y(y-y(t))} dk_x dk_y \\ \delta(\varphi - \varphi(t)) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega(\varphi-\varphi(t))} d\omega \end{aligned} \quad (3.4)$$

Usando esta representación en el espacio de Fourier se puede volver a escribir la ecuación (3.3) como:

$$P(\mathbf{x}, \varphi, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \langle e^{ik_x(x-x(t))} e^{ik_y(y-y(t))} e^{i\omega(\varphi-\varphi(t))} \rangle dk_x dk_y d\omega \quad (3.5)$$

Ahora, si queremos dar la evolución temporal de  $P(\mathbf{x}, \varphi, t)$ , debemos establecer una ecuación diferencial. Una manera para lograr esto es derivar la ecuación (3.5) con respecto al tiempo.

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\mathbf{x}, \varphi, t)}{\partial t} &= - \left\langle \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (ik_x \dot{x}(t)) e^{ik_x(x-x(t))} e^{ik_y(y-y(t))} e^{i\omega(\varphi-\varphi(t))} dk_x dk_y d\omega \right\rangle \\ &\quad - \left\langle \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (ik_y \dot{y}(t)) e^{ik_x(x-x(t))} e^{ik_y(y-y(t))} e^{i\omega(\varphi-\varphi(t))} dk_x dk_y d\omega \right\rangle \\ &\quad - \left\langle \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (i\omega \dot{\varphi}(t)) e^{ik_x(x-x(t))} e^{ik_y(y-y(t))} e^{i\omega(\varphi-\varphi(t))} dk_x dk_y d\omega \right\rangle \\ &= - \left\langle \frac{\partial}{\partial x} \dot{x}(t) \delta^{(2)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}(t)) \delta(\varphi - \varphi(t)) \right\rangle \\ &\quad - \left\langle \frac{\partial}{\partial y} \dot{y}(t) \delta^{(2)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}(t)) \delta(\varphi - \varphi(t)) \right\rangle \\ &\quad - \left\langle \frac{\partial}{\partial \varphi} \dot{\varphi}(t) \delta^{(2)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}(t)) \delta(\varphi - \varphi(t)) \right\rangle \\ &= -(v_0 \cos \varphi) \frac{\partial P(\mathbf{x}, \varphi, t)}{\partial x} - (v_0 \sin \varphi) \frac{\partial P(\mathbf{x}, \varphi, t)}{\partial y} \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial \varphi} \langle \xi_\varphi(t) \delta^{(2)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}(t)) \delta(\varphi - \varphi(t)) \rangle. \end{aligned}$$

(3.6)

Ahora tenemos que encontrar la manera de calcular el tercer término de la ecuación (3.6), pero no resulta difícil, ya que en el modelo (3.1) se utilizó una variable aleatoria con las propiedades (3.2). Entonces podemos utilizar el *Teorema de Novikov* [?] en su versión más sencilla. El teorema dice lo siguiente:

**Teorema de Novikov.** *Si  $\xi(t)$  es una variable estocástica delta-correlacionada y  $F(\xi(t))$  es una función de esa variable, entonces se tiene que*

$$\langle \xi(t)F(\xi(t)) \rangle = \gamma \left\langle \frac{\delta F(\xi(t))}{\delta \xi(t)} \right\rangle. \quad (3.7)$$

En nuestro caso tenemos que la función  $F(\xi(t))$  es

$$F(\xi(t)) = \delta^{(2)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}(t))\delta(\varphi - \varphi(t)). \quad (3.8)$$

Resulta útil calcular el siguiente término por separado:

$$\begin{aligned} \frac{\delta [\delta(z - z(t))]}{\delta \xi(t)} &= \frac{\delta}{\delta \xi(t)} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(z-z(t))} dk \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (-ik) e^{ik(z-z(t))} \frac{\delta z(t)}{\delta \xi(t)} dk. \end{aligned} \quad (3.9)$$

En nuestro caso sustituimos  $\varphi(t)$  por  $z(t)$  y lo único que nos hace falta calcular para poder sustituir en la ecuación (3.9) es:

$$\frac{\delta \varphi(t)}{\delta \xi_{\varphi}(t)} = \frac{\delta}{\delta \xi_{\varphi}(t)} \left( \varphi(0) + \int_0^t \xi_{\varphi}(\tau) d\tau \right) = \int_0^t \frac{\delta \xi_{\varphi}(\tau)}{\delta \xi_{\varphi}(t)} d\tau = \int_0^t \delta(t-\tau) d\tau = 1. \quad (3.10)$$

Ahora sí podemos calcular el tercer término de la ecuación (3.6):

$$\begin{aligned}
\langle \xi_\varphi(t) \delta^{(2)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}(t)) \delta(\varphi - \varphi(t)) \rangle &= \gamma \left\langle \frac{\delta [\delta^{(2)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}(t)) \delta(\varphi - \varphi(t))]}{\delta \xi_\varphi(t)} \right\rangle \\
&= \gamma \left\langle \delta^{(2)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}(t)) \frac{\delta}{\delta \xi_\varphi(t)} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega(\varphi - \varphi(t))} d\omega \right\rangle \\
&= \gamma \left\langle \delta^{(2)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}(t)) \int_{-\infty}^{\infty} (-i\omega) \frac{\delta \varphi(t)}{\delta \xi_\varphi(t)} e^{i\omega(\varphi - \varphi(t))} d\omega \right\rangle \\
&= \gamma \left\langle -\frac{\partial}{\partial \varphi} \delta^{(2)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}(t)) \delta(\varphi - \varphi(t)) \right\rangle \\
&= -\gamma \frac{\partial P(\mathbf{x}, \varphi, t)}{\partial \varphi}.
\end{aligned} \tag{3.11}$$

Al final obtenemos la ecuación de Fokker-Planck para agentes brownianos con rapidez constante:

$$\frac{\partial P(\mathbf{x}, \varphi, t)}{\partial t} + v_0 \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla P(\mathbf{x}, \varphi, t) = \gamma \frac{\partial^2 P(\mathbf{x}, \varphi, t)}{\partial \varphi^2}. \tag{3.12}$$

Esta ecuación ha sido derivada en trabajos anteriores, como por ejemplo [?]. El sistema que se estudia en [?] es el de partículas brownianas en dos dimensiones sobre las cuales actúan fuerzas perpendiculares a su velocidad. Ellos no dan una expresión analítica de la solución de (3.12) y estudian numéricamente la solución en el espacio fase, no en el espacio de coordenadas.

### 3.3. Solución a la ecuación de Fokker-Planck

Estamos interesados en obtener la probabilidad  $P(\mathbf{x}, \varphi, t) d^2\mathbf{x} d\varphi$  de encontrar a una partícula en una posición en un elemento de volumen  $d^2\mathbf{x}$  centrado en  $\mathbf{x}$ , con un ángulo entre  $\varphi$  y  $\varphi + d\varphi$  a un tiempo  $t$ . Para lograrlo debemos resolver la ecuación (3.12), la cual involucra derivadas temporales, espaciales y angulares. Es por eso que utilizaremos las Transformadas de Fourier, la discreta y la continua, para resolver la ecuación maestra anterior, tomando como condición inicial que todas las partículas se encuentren en el origen y tomen con igual probabilidad un ángulo inicial

$$P(\mathbf{x}, \varphi, 0) = \frac{1}{2\pi} \delta^{(2)}(\mathbf{x}). \tag{3.13}$$

En la Figura 3.1a se puede observar cómo se ve la condición inicial. La transformada de Fourier continua que utilizaremos es la siguiente:

$$P(\mathbf{x}, \varphi, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} P(\mathbf{k}, \varphi, t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} dk_x dk_y, \quad (3.14)$$

cuya transformada inversa es:

$$P(\mathbf{k}, \varphi, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} P(\mathbf{x}, \varphi, t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} dx dy. \quad (3.15)$$

Utilizando la ecuación (3.14) en (3.12) nos da lo siguiente:

$$\frac{\partial P(\mathbf{k}, \varphi, t)}{\partial t} = -iv_0(k_x \cos \varphi + k_y \sin \varphi) P(\mathbf{k}, \varphi, t) + \gamma \frac{\partial^2 P(\mathbf{k}, \varphi, t)}{\partial \varphi^2} \quad (3.16)$$

Es claro que ahora sólo se tienen derivadas en el tiempo y en el ángulo. Para quitarnos las derivadas angulares hacemos uso de la transformada de Fourier discreta que es la siguiente:

$$\begin{aligned} P(\mathbf{k}, \varphi, t) &= \sum_{-\infty}^{\infty} \tilde{P}_n(\mathbf{k}, t) e^{in\varphi}, \\ \tilde{P}_0(\mathbf{k}, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} P(\mathbf{k}, \varphi, t) d\varphi, \\ \tilde{P}_n(\mathbf{k}, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} P(\mathbf{k}, \varphi, t) e^{-in\varphi} d\varphi, \\ \tilde{P}_{-n}(\mathbf{k}, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} P(\mathbf{k}, \varphi, t) e^{in\varphi} d\varphi, \end{aligned} \quad (3.17)$$

donde se satisface la condición  $\tilde{P}_n(\mathbf{k}, t) = \tilde{P}_{-n}^*(-\mathbf{k}, t)$  y la condición inicial se convierte en

$$\tilde{P}_n(\mathbf{k}, 0) = \frac{1}{2\pi} \delta_{n,0}, \quad (3.18)$$

con  $\delta_{n,0}$  la función Delta de Kronecker.

Al sustituir (3.17) en (3.16), utilizar las propiedades de ortogonalidad de las exponenciales complejas y reescribir la ecuación de Fokker-Planck se obtiene una ecuación que es la siguiente:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{P}_m(\mathbf{k}, t)}{\partial t} = & - \left( \frac{ik_x v_0}{2} + \frac{k_y v_0}{2} \right) \tilde{P}_{m-1}(\mathbf{k}, t) \\ & + \left( -\frac{ik_x v_0}{2} + \frac{k_y v_0}{2} \right) \tilde{P}_{m+1}(\mathbf{k}, t) - \gamma m^2 \tilde{P}_m(\mathbf{k}, t). \end{aligned} \quad (3.19)$$

La ecuación (3.19) es una ecuación que relaciona los modos de Fourier; el modo  $m$  está relacionado con el modo  $m - 1$  y con el modo  $m + 1$ . Queremos quitarnos el término que tiene el coeficiente  $m^2$  y para ello proponemos la siguiente transformación:

$$\tilde{P}_m(\mathbf{k}, t) = e^{-\gamma m^2 t} \tilde{p}_m(\mathbf{k}, t). \quad (3.20)$$

De esta manera llegamos al siguiente sistema infinito de ecuaciones diferenciales acopladas:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{p}_m(\mathbf{k}, t)}{\partial t} = & \left( -\frac{ik_x v_0}{2} - \frac{k_y v_0}{2} \right) e^{(2m-1)t\gamma} \tilde{p}_{m-1}(\mathbf{k}, t) \\ & + \left( -\frac{ik_x v_0}{2} + \frac{k_y v_0}{2} \right) e^{-(2m+1)t\gamma} \tilde{p}_{m+1}(\mathbf{k}, t). \end{aligned} \quad (3.21)$$

Al sistema (3.21) se le puede representar como una matriz infinita con elementos distintos de cero en las diagonales inmediatas superior e inferior.

Hasta la ecuación anterior, todo el desarrollo que se ha llevado a cabo para resolver (3.12) ha sido de manera exacta. Aún cuando, en principio, el sistema (3.21) se podría resolver con el método de fracciones continuas [?], nosotros estamos interesados en la descripción del sistema de tal manera que sólo la posición de la partícula es relevante.

Muchas veces para la aplicación del modelo a diferentes sistemas se requiere la probabilidad de encontrar a una partícula en un elemento de volumen  $d^2 \mathbf{x}$  centrado en  $\mathbf{x}$  al tiempo  $t$ , sin necesidad de tener la información sobre el ángulo  $\varphi$ . Es decir, se necesita calcular la marginal del ángulo  $\varphi$ . Siendo así, lo que debemos de hacer es quitarnos la información del ángulo. Para ello integramos en todo un período de la siguiente manera:

$$P_0(\mathbf{x}, t) = \int_{-\pi}^{\pi} P(\mathbf{x}, \varphi, t) d\varphi. \quad (3.22)$$

La aparición explícita de los factores exponenciales nos da una herramienta para llevar a cabo un análisis de  $P_0(\mathbf{x}, t)$  en diferentes intervalos temporales. Este análisis lo iniciaremos en el límite difusivo (tiempos largos) y lo extenderemos a tiempos más cercanos a cero.

### 3.3.1. Aproximación con tres modos (régimen difusivo)

Para estudiar el régimen difusivo, es decir de tiempos largos, hay que tomar el límite  $e^{-3\gamma t} \ll 1$  en el sistema (3.21). De esta manera nos quedaríamos solamente con 3 ecuaciones diferenciales acopladas, que son las correspondientes a los modos de orden  $m = 0, \pm 1$ . El sistema de ecuaciones resultante es:

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{p}_0(\mathbf{k}, t) = -\frac{v_0}{2} e^{-\gamma t} [(ik_x + k_y) \tilde{p}_{-1}(\mathbf{k}, t) + (ik_x - k_y) \tilde{p}_1(\mathbf{k}, t)] \quad (3.23a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{p}_{\pm 1}(\mathbf{k}, t) = -\frac{v_0}{2} e^{\gamma t} (ik_x \pm k_y) \tilde{p}_0(\mathbf{k}, t). \quad (3.23b)$$

Resolviendo estas ecuaciones se puede obtener la ecuación del telegrafista: derivamos primero la ecuación (3.23a) con respecto al tiempo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \tilde{p}_0(\mathbf{k}, t)}{\partial t^2} - \gamma \frac{v_0}{2} e^{-\gamma t} [(ik_x + k_y) \tilde{p}_{-1}(\mathbf{k}, t) + (ik_x - k_y) \tilde{p}_1(\mathbf{k}, t)] = \\ -\frac{v_0}{2} e^{-\gamma t} \left[ (ik_x + k_y) \frac{\partial \tilde{p}_{-1}(\mathbf{k}, t)}{\partial t} + (ik_x - k_y) \frac{\partial \tilde{p}_1(\mathbf{k}, t)}{\partial t} \right]. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Aquí nos damos cuenta que en la ecuación anterior podemos volver a sustituir la ecuación (3.23a), y nos queda

$$\frac{\partial^2 \tilde{p}_0(\mathbf{k}, t)}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial \tilde{p}_0(\mathbf{k}, t)}{\partial t} = -\frac{v_0}{2} e^{-\gamma t} \left[ (ik_x + k_y) \frac{\partial \tilde{p}_{-1}(\mathbf{k}, t)}{\partial t} + (ik_x - k_y) \frac{\partial \tilde{p}_1(\mathbf{k}, t)}{\partial t} \right]. \quad (3.25)$$

En la ecuación (3.25) podemos sustituir los valores para  $\frac{\partial \tilde{p}_{-1}}{\partial t}$  y  $\frac{\partial \tilde{p}_1}{\partial t}$  que están dados en (3.23b):

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \tilde{p}_0(\mathbf{k}, t)}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial \tilde{p}_0(\mathbf{k}, t)}{\partial t} &= \frac{v_0^2}{2} [(ik_x + k_y)(ik_x - k_y) \tilde{p}_0(\mathbf{k}, t)] \\ &= -\frac{v_0^2}{2} (k_x^2 + k_y^2) \tilde{p}_0(\mathbf{k}, t).\end{aligned}\quad (3.26)$$

Al transformar inversamente en Fourier nos queda la ecuación del telegrafista:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} P_0(\mathbf{x}, t) + \gamma \frac{\partial}{\partial t} P_0(\mathbf{x}, t) = \frac{v_0^2}{2} \nabla^2 P_0(\mathbf{x}, t). \quad (3.27)$$

Este resultado no contradice al trabajo de Porrà, Masoliver y Weiss [?] ya que es válido en el régimen de tiempos largos.

La solución a la ecuación del telegrafista ha sido estudiada ampliamente [?] y corresponde a nuestra primera aproximación al problema. La ecuación (3.27) describe la propagación de pulsos ondulatorios para un régimen de tiempos cortos que viajan con una velocidad disminuida en un factor de  $\frac{1}{\sqrt{2}}$  (y no con  $v_0$ ). Aquí correspondería estudiar el límite asintótico  $\gamma t \rightarrow \infty$ . Al hacer este límite en la ecuación del telegrafista, el término que domina es el término dispersivo sobre el término inercial. El primero está dado por la primera derivada con respecto al tiempo, y el segundo por la segunda derivada con respecto al tiempo. Por eso, la ecuación (3.27) se reduce a la ecuación de difusión con constante de difusión  $D = \frac{v_0^2}{2\gamma}$ . La solución explícita está dada en las referencias [?, ?]. Para resolverla se utilizan condiciones estándar de frontera en el infinito:

$$P_0(\mathbf{x}, t)|_{|\mathbf{x}| \rightarrow \infty} \rightarrow 0 \quad (3.28)$$

y condiciones iniciales

$$P_0(\mathbf{x}, t = 0) = \delta^{(2)}(\mathbf{x}), \quad (3.29)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} P_0(\mathbf{x}, t = 0) = 0. \quad (3.30)$$

Las condiciones (3.29) y (3.30) surgen de utilizar las condiciones iniciales en el sistema (3.19).

Recordemos que la solución a la ecuación del telegrafista en dos dimensiones, que se había dado en (2.40), viene dada en términos de  $\alpha = \frac{\gamma}{\sqrt{2v_0}} \sqrt{\frac{v_0^2 t^2}{2} - x^2}$  [?]:

$$P(x, t) = \frac{\gamma e^{-\frac{\gamma t}{2}}}{2^{\frac{2}{3}} \pi v_0 \sqrt{\frac{v_0^2 t^2}{2} - x^2}} \left( \cosh \alpha + \frac{\gamma t \sinh \alpha}{2\alpha} \right) H \left( \frac{v_0 t}{\sqrt{2}} - x \right) + \frac{e^{-\frac{\gamma t}{2}}}{\pi \sqrt{2v_0}} \cosh \alpha \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{H \left( \frac{v_0 t}{\sqrt{2}} - x \right)}{\sqrt{\frac{v_0^2 t^2}{2} - x^2}} \right), \quad (3.31)$$

en donde  $x = |\mathbf{x}|$  y  $H(x)$  es la función escalón de Heaviside,  $H(x) = 1$  para  $x > 0$  y  $H(x) = 0$  para  $x < 0$ .

En el espacio de Fourier, la solución de (3.27) es relativamente sencilla y tiene la misma forma para cualquier dimensión:

$$\tilde{P}_0(\mathbf{k}, t) = \tilde{P}_0(\mathbf{k}, 0) e^{-\frac{\gamma t}{2}} \left( \gamma \frac{\sin c_d \omega_{k_d} t}{2\omega_{k_d}} + \cos c_d \omega_{k_d} t \right), \quad (3.32)$$

en donde

$$\omega_{k_d}^2 \equiv c_d^2 k_d^2 - \frac{\gamma^2}{4} \quad (3.33)$$

y

$$c_d \equiv \frac{v_0}{\sqrt{d}}. \quad (3.34)$$

Aquí se denota a la norma del vector de onda en el espacio de Fourier en  $d$  dimensiones como  $k_d$ .

Si estudiamos la ecuación (3.32) en el límite de tiempos cortos, esta solución se va a poder aproximar por

$$\tilde{P}_0(\mathbf{k}, t) \approx \tilde{P}_0(\mathbf{k}, 0) \cos(c_d k_d t) \quad (3.35)$$

y la aproximación (3.35) resulta también ser la solución normalizada de la ecuación de onda



$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} P(\mathbf{x}, t) = v_0^2 \nabla^2 P(\mathbf{x}, t) \quad (3.36)$$

en  $d$  dimensiones con condiciones iniciales

$$\tilde{P}_0(\mathbf{k}, 0) = 1, \quad (3.37)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{P}_0(\mathbf{k}, 0) = 0. \quad (3.38)$$

### 3.3.2. Aproximación con cinco modos

Recordando que resolviendo el sistema (3.21) se obtiene la solución analítica exacta para (3.12), ahora estudiamos la segunda aproximación de dicho sistema, lo cual implica tomar los primeros 5 modos de Fourier,  $m = \pm 2, \pm 1, 0$ . Al hacer una aproximación (análoga a la que se hizo en la aproximación a primer orden) de tal manera que  $e^{-5\gamma t} \ll 1$ , se llega a las siguientes ecuaciones diferenciales acopladas:

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{p}_0(\mathbf{k}, t) = -\frac{v_0}{2} e^{-\gamma t} [(ik_x + k_y) \tilde{p}_{-1}(\mathbf{k}, t) + (ik_x - k_y) \tilde{p}_1(\mathbf{k}, t)], \quad (3.39a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{p}_{\pm 1}(\mathbf{k}, t) = -\frac{v_0}{2} e^{\gamma t} [(ik_x \pm k_y) \tilde{p}_0(\mathbf{k}, t) + e^{-4\gamma t} (ik_x \mp k_y) \tilde{p}_{\pm 2}(\mathbf{k}, t)], \quad (3.39b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{p}_{\pm 2}(\mathbf{k}, t) = -\frac{v_0}{2} e^{3\gamma t} (ik_x \pm k_y) \tilde{p}_{\pm 1}(\mathbf{k}, t). \quad (3.39c)$$

En el Apéndice C se muestra que al resolver el sistema (3.39) se obtiene una generalización de la ecuación del telegrafista (3.27) para  $P_0(\mathbf{x}, t)$ :

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} P_0(\mathbf{x}, t) + \gamma \frac{\partial}{\partial t} P_0(\mathbf{x}, t) = v_0^2 \nabla^2 \int_0^t \phi(t-s) P_0(\mathbf{x}, s) ds + \frac{v_0^2}{4} e^{-4\gamma t} Q(\mathbf{x}). \quad (3.40)$$

Aquí aparece una función no local en el tiempo llamada  $\phi(t-s)$  y que tiene la siguiente expresión:

$$\phi(t-s) = \frac{3}{4}\delta(t-s) - \gamma e^{-4\gamma(t-s)}. \quad (3.41)$$

Por otro lado, el término  $Q(\mathbf{x})$  viene dado por las condiciones iniciales para  $P(\mathbf{x}, \varphi, 0)$ :

$$Q(\mathbf{x}) = \int_0^{2\pi} [e^{i2\varphi} (\partial_x + i\partial_y)^2 + e^{-i2\varphi} (\partial_x - i\partial_y)^2 - (\partial_x^2 + \partial_y^2)] P(\mathbf{x}, \varphi, 0) d\varphi. \quad (3.42)$$

La aparición de términos de memoria es común cuando se calcula la probabilidad marginal, como la que se hizo en (3.22), en procesos markovianos como el estudiado en esta tesis.

En el régimen de validez de esta segunda aproximación, la solución a (3.40) en el espacio de Fourier–Laplace es de la forma

$$\hat{P}_0(\mathbf{k}, \epsilon) = \frac{(\epsilon + \gamma)\tilde{P}_0(\mathbf{k}, 0) + \left(\frac{v_0^2}{4}\right) \frac{\tilde{Q}(\mathbf{k})}{(\epsilon+4\gamma)}}{\epsilon^2 + \gamma\epsilon + v_0^2 k^2 \hat{\phi}(\epsilon)}, \quad (3.43)$$

en donde  $\hat{\phi}(\epsilon) = \frac{3}{4} - \gamma \frac{1}{(\epsilon+4\gamma)}$ . Esto se demuestra utilizando la transformada de Laplace:

$$\mathcal{L}\{f(t)\} = \hat{f}(\epsilon) = \int_0^\infty e^{-\epsilon t} f(t) dt. \quad (3.44)$$

Además de la definición de esta transformada, se necesitan las siguientes propiedades generales para una función  $f(t)$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\{f'(t)\} &= \epsilon \mathcal{L}\{f(t)\} - f(0), \\ \mathcal{L}\{f''(t)\} &= \epsilon^2 \mathcal{L}\{f(t)\} - \epsilon f(0) - f'(0), \\ \mathcal{L}\{e^{-\alpha t}\} &= \frac{1}{\epsilon + \alpha}. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Haciendo uso de las propiedades (3.45), nos queda que la ecuación (3.40) se reescribe como:

$$\begin{aligned}
\epsilon^2 \widehat{P}_0(\mathbf{k}, \epsilon) - \epsilon \widetilde{P}_0(\mathbf{k}, 0) - \frac{\partial \widetilde{P}_0(\mathbf{k}, 0)}{\partial t} + \gamma \left[ \epsilon \widehat{P}_0(\mathbf{k}, \epsilon) - \widetilde{P}_0(\mathbf{k}, 0) \right] \\
= -v_0^2 k^2 \widehat{\phi}(\epsilon) \widehat{P}_0(\mathbf{k}, \epsilon) + \left( \frac{v_0^2}{4} \right) \frac{\widetilde{Q}(\mathbf{k})}{\epsilon + 4\gamma},
\end{aligned} \quad (3.46)$$

y por lo tanto

$$(\epsilon^2 + \gamma\epsilon + v_0^2 k^2 \widehat{\phi}(\epsilon)) \widehat{P}_0(\mathbf{k}, \epsilon) = (\epsilon + \gamma) \widetilde{P}_0(\mathbf{k}, 0) + \left( \frac{v_0^2}{4} \right) \frac{\widetilde{Q}(\mathbf{k})}{\epsilon + 4\gamma}. \quad (3.47)$$

Reescribiendo la ecuación (3.47), se llega a la expresión (3.43).

La ecuación (3.43) es una ecuación inhomogénea debido a los términos dados por  $\widetilde{P}_0(\mathbf{k}, 0)$  y  $\widetilde{Q}(\mathbf{k})$ . Por lo tanto, conviene primero estudiar el problema homogéneo, para lo cual necesitamos poder invertir la función de Green,

$$G(\mathbf{k}, \epsilon) = \frac{1}{\epsilon^2 + \gamma\epsilon + v_0^2 k^2 \widehat{\phi}(\epsilon)}. \quad (3.48)$$

En el Apéndice C se muestra que para el régimen temporal que nos interesa,  $\epsilon \ll 4\gamma$ , y el régimen espacial  $k \ll \frac{4\gamma}{v_0}$ , la inversión de la Función de Green (3.48) se puede aproximar por

$$G(\mathbf{x}, t) = \frac{8\gamma}{\pi v_0^2} \int e^{-\frac{8\gamma}{v_0^2}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')^2} G_{TE}(\mathbf{x}', t) d^2 \mathbf{x}', \quad (3.49)$$

en donde  $G_{TE}(\mathbf{x}, t)$  es la bien estudiada Función de Green de la ecuación del telegrafista [?, ?].

Aún cuando es posible continuar el estudio y considerar los siguientes dos modos de Fourier ( $n = \pm 3$ ), notamos que las derivadas temporales de orden cuarto comienzan a aparecer en la descripción y la función de memoria se vuelve muy complicada, haciendo que el análisis más difícil de lo necesario.



# 4

## Resultados y discusión

Como se ha mencionado anteriormente, la ecuación del telegrafista da una buena descripción para partículas que se mueven con rapidez constante en una dimensión [?] pero resulta ser que la generalización a 2 dimensiones no es fácil. Para estudiar las soluciones de (3.27) y (3.40), lo que se hizo fue calcular el desplazamiento cuadrático medio y la curtosis para ambas aproximaciones y se comparó con los resultados de las simulaciones numéricas que se obtienen de resolver (3.1). Estos cálculos numéricos se realizaron utilizando un programa escrito en C++ en donde se obtenía el histograma para diferentes tiempos. Para ello se utilizaron  $10^5$  trayectorias y se utilizó un intervalo temporal que va de  $10^{-2}$  a  $10^6$ .

### 4.1. El desplazamiento cuadrático medio (DCM)

Para calcular el DCM se utiliza la definición

$$\langle \mathbf{x}^2(t) \rangle \equiv \int \mathbf{x}^2 P_0(\mathbf{x}, t) d^2 \mathbf{x} \quad (4.1)$$

Para calcular el DCM con las aproximaciones (3.27) y (3.40) se multiplica por  $\mathbf{x}^2$  y se integra sobre todo el espacio.

De la ecuación (3.27) obtenemos:

$$\begin{aligned}
& \frac{d^2}{dt^2} \left( \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (x^2 + y^2) P_0(\mathbf{x}, t) dx dy \right) + \gamma \frac{d}{dt} \left( \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (x^2 + y^2) P_0(\mathbf{x}, t) dx dy \right) \\
&= \frac{v_0^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (x^2 + y^2) \nabla^2 P_0(\mathbf{x}, t) dx dy
\end{aligned} \tag{4.2}$$

Reescribiendo la ecuación (4.2) explícitamente, queda

$$\begin{aligned}
& \frac{d^2}{dt^2} \langle \mathbf{x}^2(t) \rangle + \gamma \frac{d}{dt} \langle \mathbf{x}^2(t) \rangle = \frac{v_0^2}{2} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} P_0(\mathbf{x}, t) dx dy \right. \\
&+ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} P_0(\mathbf{x}, t) dx dy + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} y^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} P_0(\mathbf{x}, t) dx dy \\
&\left. + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} y^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} P_0(\mathbf{x}, t) dx dy \right\}.
\end{aligned} \tag{4.3}$$

Por la simetría de las integrales (4.3), sólo se necesita calcular dos términos, los cuales son:

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} P_0(\mathbf{x}, t) dx dy = \int_{-\infty}^{\infty} \left( x^2 \frac{\partial}{\partial x} P_0(\mathbf{x}, t) \Big|_{-\infty}^{\infty} \right. \\
&- 2 \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial}{\partial x} P_0(\mathbf{x}, t) dx \Big) dy = -2 \int_{-\infty}^{\infty} \left( x P_0(\mathbf{x}, t) \Big|_{-\infty}^{\infty} \right. \\
&- \int_{-\infty}^{\infty} P_0(\mathbf{x}, t) dx \Big) dy = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} P_0(\mathbf{x}, t) dx dy = 2.
\end{aligned} \tag{4.4}$$

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} P_0(\mathbf{x}, t) dx dy = \int_{-\infty}^{\infty} \left( \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2}{\partial y^2} P_0(\mathbf{x}, t) dy \right) x^2 dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{\partial}{\partial y} P_0(\mathbf{x}, t) \Big|_{-\infty}^{\infty} \right) x^2 dx = 0.
\end{aligned} \tag{4.5}$$

Haciendo lo mismo para la ecuación (3.40) va a quedar:

$$\begin{aligned}
\frac{d^2}{dt^2}\langle \mathbf{x}^2(t) \rangle + \gamma \frac{d}{dt}\langle \mathbf{x}^2(t) \rangle &= \frac{3v_0^2}{4} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (x^2 + y^2) \nabla^2 P_0(\mathbf{x}, t) dx dy \\
&- \gamma v_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (x^2 + y^2) \nabla^2 \left( \int_0^t e^{-4\gamma(t-s)} P_0(\mathbf{x}, s) ds \right) dx dy \\
&+ v_0^2 e^{-4\gamma t} \left( \frac{1}{4} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (x^2 + y^2) Q(\mathbf{x}) dx dy \right).
\end{aligned} \tag{4.6}$$

Reescribiendo la ecuación (4.6) y llamando

$$\beta = \int Q(\mathbf{x}) \mathbf{x}^2 d^2\mathbf{x}, \tag{4.7}$$

entonces nos va a quedar:

$$\begin{aligned}
\frac{d^2}{dt^2}\langle \mathbf{x}^2(t) \rangle + \gamma \frac{d}{dt}\langle \mathbf{x}^2(t) \rangle &= 3v_0^2 + v_0^2 e^{-4\gamma t} \left( \frac{\beta}{4} \right) \\
&- \gamma v_0^2 \int_0^t e^{-4\gamma(t-s)} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (x^2 + y^2) \nabla^2 P_0(\mathbf{x}, s) dx dy \right] ds \\
&= 3v_0^2 + v_0^2 e^{-4\gamma t} \left( \frac{\beta}{4} \right) - 4\gamma v_0^2 \int_0^t e^{-4\gamma(t-s)} ds \\
&= 3v_0^2 + v_0^2 e^{-4\gamma t} \left( \frac{\beta}{4} \right) - v_0^2 \left( e^{-4\gamma(t-s)} \right) \Big|_0^t \\
&= 3v_0^2 + v_0^2 e^{-4\gamma t} \left( \frac{\beta}{4} \right) - v_0^2 (1 - e^{-4\gamma t}) \\
&= 2v_0^2 + v_0^2 e^{-4\gamma t} (1 + \beta/4).
\end{aligned} \tag{4.8}$$

Por lo tanto se ha mostrado que las ecuaciones diferenciales resultantes para el desplazamiento cuadrático medio son:

$$\frac{d^2}{dt^2}\langle \mathbf{x}^2(t) \rangle + \gamma \frac{d}{dt}\langle \mathbf{x}^2(t) \rangle = 2v_0^2 \tag{4.9a}$$

$$\frac{d^2}{dt^2}\langle \mathbf{x}^2(t) \rangle + \gamma \frac{d}{dt}\langle \mathbf{x}^2(t) \rangle = 2v_0^2 + v_0^2 e^{-4\gamma t} (1 + \beta/4), \tag{4.9b}$$

En el Apéndice A se muestra que  $\beta = -4$  para condiciones iniciales que no dependen del ángulo.

De esta manera resulta que el DCM tiene la misma forma para ambas aproximaciones en el caso que  $\beta = -4$ . Para resolver (4.9a) y (4.9b) necesitamos observar que, dadas las condiciones iniciales, la solución a la ecuación homogénea es simplemente la condición inicial, que es una constante y vale cero. La solución particular a la ecuación no homogénea se obtiene de la siguiente manera: primero se integra (4.9a) una vez con respecto al tiempo de 0 a  $t$  y se obtiene

$$\begin{aligned} \int_0^t \frac{d^2 \langle \mathbf{x}^2(t) \rangle}{dt^2} dt + \gamma \int_0^t \frac{d \langle \mathbf{x}^2(t) \rangle}{dt} dt &= 2v_0^2 \int_0^t dt \\ \Leftrightarrow \frac{d \langle \mathbf{x}^2(t) \rangle}{dt} - \cancel{\frac{d \langle \mathbf{x}^2(0) \rangle}{dt}} + \gamma \left( \langle \mathbf{x}^2(t) \rangle - \cancel{\langle \mathbf{x}^2(0) \rangle} \right) &= 2v_0^2 t \quad (4.10) \\ \Leftrightarrow \frac{d \langle \mathbf{x}^2(t) \rangle}{dt} + \gamma \langle \mathbf{x}^2(t) \rangle &= 2v_0^2 t. \end{aligned}$$

Para resolver la ecuación anterior proponemos una solución de la forma

$$\langle \mathbf{x}^2(t) \rangle = e^{-\gamma t} F(t), \quad (4.11)$$

cuya derivada es

$$\frac{d \langle \mathbf{x}^2(t) \rangle}{dt} = -\gamma e^{-\gamma t} F(t) + e^{-\gamma t} \frac{dF(t)}{dt}. \quad (4.12)$$

Sustituimos esta propuesta y su derivada en (4.10) para obtener lo siguiente:

$$\begin{aligned} -\gamma e^{-\gamma t} F(t) + e^{-\gamma t} \frac{dF(t)}{dt} + \gamma e^{-\gamma t} F(t) &= 2v_0^2 t \\ \Leftrightarrow e^{-\gamma t} \left( \cancel{-\gamma F(t)} + \frac{dF(t)}{dt} + \cancel{\gamma F(t)} - 2v_0^2 t e^{\gamma t} \right) &= 0 \\ \Leftrightarrow e^{-\gamma t} \left( \frac{dF(t)}{dt} - 2v_0^2 t e^{\gamma t} \right) &= 0 \\ \Rightarrow \frac{dF(t)}{dt} &= 2v_0^2 t e^{\gamma t}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Al integrar la ecuación anterior se obtiene el siguiente resultado para la función  $F(t)$ :

$$F(t) - \cancel{F(0)} = F(t) = 2v_0^2 \int_0^t t e^{\gamma t} dt = \frac{2v_0^2}{\gamma^2} (1 + e^{\gamma t} (t\gamma - 1)). \quad (4.14)$$



Por lo tanto, cuando se toman soluciones iniciales circularmente simétricas, la solución para (4.9a) y (4.9b) es:

$$\langle \mathbf{x}^2(t) \rangle = \frac{2v_0^2}{\gamma^2} [\gamma t - (1 - e^{-\gamma t})]. \quad (4.15)$$

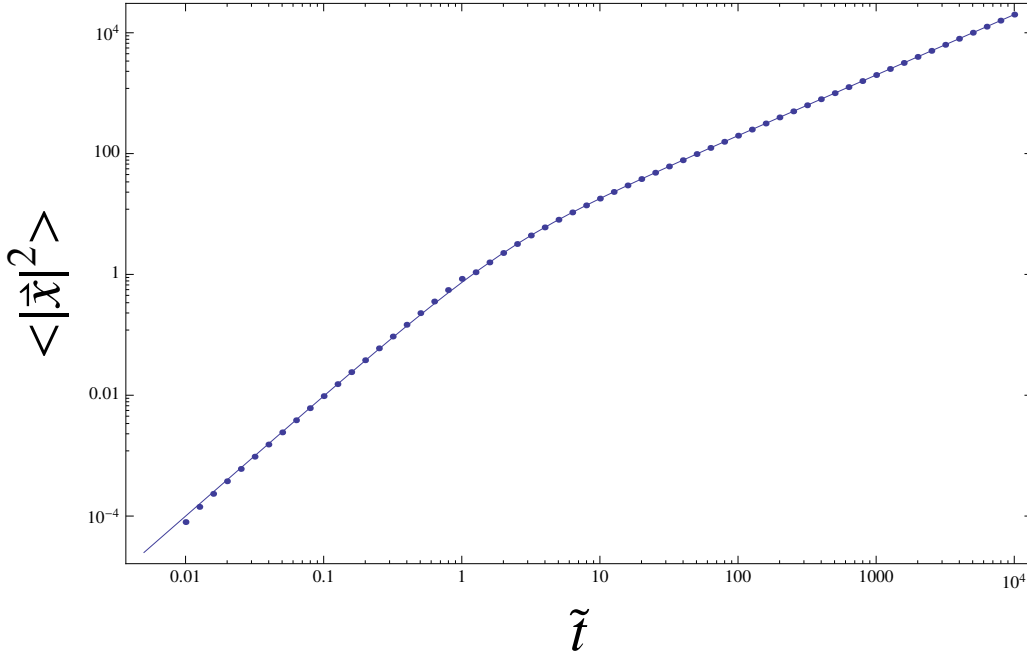


Figura 4.1: Desplazamiento cuadrático medio (DCM) en unidades de  $(v_0/\gamma)^2$  vs.  $\gamma t = \tilde{t}$ . La línea continua en color azul es la aproximación analítica dada por la expresión (4.15), los datos que se muestran en puntos se obtuvieron al promediar la solución numérica de las ecuaciones (3.1), considerando  $10^5$  trayectorias e integrando sobre  $2 \times 10^6$  pasos de tiempo.

Como se ve en la Figura 4.1, el DCM no provee una medida para distinguir entre la primera aproximación y la segunda. Al graficar el DCM para simulaciones numéricas y compararla con (4.15), se ve que tampoco hay diferencia.

Hay que notar que para resolver (4.9) se utilizó la condición inicial

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{x}^2(t) \rangle|_{t=0} = 0, \quad (4.16)$$

basados en el comportamiento físico esperado, ya que todas las partículas se encuentran en el origen al tiempo  $t = 0$ . Esto es intuitivo si se piensa

que las partículas están totalmente localizadas al inicio y la variación de esta localización es cero.

Para  $\gamma t \ll 1$ , las partículas muestran una dependencia cuadrática en  $t$  ( $\sim t^2$ ) la cual corresponde a un régimen balístico. Para tiempos largos, la dependencia lineal en  $t$  es evidente y lleva a que la constante de difusión efectiva sea

$$D \equiv \frac{v_0^2}{2\gamma}. \quad (4.17)$$

La expresión (4.15) coincide con el resultado para el problema de movimiento browniano normal (es decir, con rapidezces fluctuantes) en dos dimensiones al hacer la identificación

$$\sqrt{\langle \mathbf{x}^2 \rangle} = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}} t, \quad (4.18)$$

con  $k_B$  es la constante de Boltzmann,  $T$  la temperatura y  $m$  la masa de las partículas.

## 4.2. Resultados de oblicuidad y curtosis

Dado que el DCM no resultó ser un parámetro para diferenciar los comportamientos entre las soluciones de (3.27), (3.40) y los cálculos numéricos, necesitamos encontrar una medida que sí nos dé una idea del comportamiento a tiempos cortos, y de las diferencias en el mismo. La curtosis resultó ser adecuada, ya que como el objeto de estudio son distribuciones circularmente simétricas, la oblicuidad resulta valer cero, como se hizo notar en el capítulo 2, y por lo tanto no es útil. La curtosis ha sido utilizada y generalizada de su definición original en una dimensión para medir y probar distribuciones normales multivariadas [?].

Recordemos que la definición de la curtosis es

$$\kappa = \left\langle [(\mathbf{x} - \langle \mathbf{x} \rangle) \Sigma^{-1} (\mathbf{x} - \langle \mathbf{x} \rangle)^T]^2 \right\rangle, \quad (4.19)$$

en donde  $\mathbf{x}^T$  denota la transpuesta del vector  $\mathbf{x}$ , y  $\Sigma$  es la matriz definida por el promedio del producto diádico

$$\Sigma \equiv \langle (\mathbf{x} - \langle \mathbf{x} \rangle)^T \cdot (\mathbf{x} - \langle \mathbf{x} \rangle) \rangle. \quad (4.20)$$

La expresión (4.19) se simplifica para distribuciones circularmente simétricas, en cuyo caso se tiene la ecuación

$$\kappa = 4 \frac{\langle |\mathbf{x}|^4 \rangle_{\text{rad}}}{\langle |\mathbf{x}|^2 \rangle_{\text{rad}}^2}, \quad (4.21)$$

en donde  $\langle \cdot \rangle_{\text{rad}}$  denota el promedio sobre la distribución radial en coordenadas polares

$$\langle \cdot \rangle_{\text{rad}} = \int_0^\infty P(r) (\cdot) r dr. \quad (4.22)$$

Esto se puede mostrar de la siguiente manera. Para distribuciones con simetría circular, la matriz  $\Sigma^{-1}$  toma la forma:

$$\Sigma^{-1} = \frac{1}{\langle x^2 \rangle \langle y^2 \rangle} \begin{pmatrix} \langle y^2 \rangle & 0 \\ 0 & \langle x^2 \rangle \end{pmatrix}.$$

Por lo tanto, la curtosis queda así:

$$\begin{aligned} \kappa &= \left( \frac{1}{\langle x^2 \rangle \langle y^2 \rangle} \right)^2 \langle (x^2 \langle y^2 \rangle + y^2 \langle x^2 \rangle)^2 \rangle \\ &= \left( \frac{1}{\langle x^2 \rangle \langle y^2 \rangle} \right)^2 \langle x^4 \langle y^2 \rangle^2 + 2x^2 y^2 \langle x^2 \rangle \langle y^2 \rangle + y^4 \langle x^2 \rangle^2 \rangle \\ &= \left( \frac{1}{\langle x^2 \rangle \langle y^2 \rangle} \right)^2 (\langle x^4 \rangle \langle y^2 \rangle^2 + 2 \langle x^2 y^2 \rangle \langle x^2 \rangle \langle y^2 \rangle + \langle y^4 \rangle \langle x^2 \rangle^2). \end{aligned} \quad (4.23)$$

Para poder calcular explícitamente la expresión anterior, es preferible obtener los términos por separado.

$$\begin{aligned}
\langle x^4 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x^4 P(|\mathbf{x}|) dx dy = \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} (r \cos \theta)^4 P(r) r dr d\theta \\
&= \int_0^{2\pi} \cos^4 \theta d\theta \int_0^{\infty} r^5 P(r) dr = \frac{3\pi}{4} \langle |\mathbf{x}|^4 \rangle_{\text{rad}}, \\
\langle y^4 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} y^4 P(|\mathbf{x}|) dx dy = \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} (r \sin \theta)^4 P(r) r dr d\theta \\
&= \int_0^{2\pi} \sin^4 \theta d\theta \int_0^{\infty} r^5 P(r) dr = \frac{3\pi}{4} \langle |\mathbf{x}|^4 \rangle_{\text{rad}}, \\
\langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 P(|\mathbf{x}|) dx dy = \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} (r \cos \theta)^2 P(r) r dr d\theta \\
&= \int_0^{2\pi} \cos^2 \theta d\theta \int_0^{\infty} r^3 P(r) dr = \pi \langle |\mathbf{x}|^2 \rangle_{\text{rad}}, \\
\langle y^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} y^2 P(|\mathbf{x}|) dx dy = \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} (r \sin \theta)^2 P(r) r dr d\theta \\
&= \int_0^{2\pi} \sin^2 \theta d\theta \int_0^{\infty} r^3 P(r) dr = \pi \langle |\mathbf{x}|^2 \rangle_{\text{rad}}, \\
\langle x^2 y^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 y^2 P(|\mathbf{x}|) dx dy = \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} (r \cos \theta)^2 (r \sin \theta)^2 P(r) r dr d\theta \\
&= \int_0^{2\pi} \sin^2 \theta \cos^2 \theta d\theta \int_0^{\infty} r^5 P(r) dr = \frac{\pi}{4} \langle |\mathbf{x}|^4 \rangle_{\text{rad}}.
\end{aligned} \tag{4.24}$$

Aquí se usó la independencia angular de la distribución. De esta manera, al sustituir (4.24) en (4.23) se obtiene el resultado (4.21) antes mencionado.

Para las distribuciones gaussianas en dos dimensiones,  $\kappa$  es independiente del promedio y la varianza y tiene el valor  $\kappa = 8$ . Por otro lado, se muestra en el Apéndice B que para condiciones iniciales con independencia angular, las soluciones normalizadas con velocidad inicial cero tienen un valor de curtosis  $\kappa = \frac{8}{3}$ .

La curtosis de las aproximaciones al problema se obtuvo de la siguiente manera. Se multiplicó por  $r^4$  a las ecuaciones (3.27) y (3.40), en donde  $r = |\mathbf{x}|$ . Luego se integran las ecuaciones de 0 a  $\infty$ . Recordando que las soluciones que se están buscando tienen independencia angular se va a tener para la ecuación del telegrafista lo siguiente:

$$\begin{aligned}
& \frac{d^2}{dt^2} \left( \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (x^2 + y^2)^2 P_0(r, t) dx dy \right) + \gamma \frac{d}{dt} \left( \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (x^2 + y^2)^2 P_0(r, t) dx dy \right) = \\
& \frac{v_0^2}{2} \left( \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (x^2 + y^2)^2 \nabla^2 P_0(r, t) dx dy \right) \\
& \Rightarrow \frac{d^2}{dt^2} (\langle x^4(t) \rangle + 2\langle x^2 y^2 \rangle + \langle y^4 \rangle) + \gamma \frac{d}{dt} (\langle x^4(t) \rangle + 2\langle x^2 y^2 \rangle + \langle y^4 \rangle) \\
& = \frac{v_0^2}{2} \left( \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} r^4 \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right] P_0(r, t) r dr d\varphi \right)
\end{aligned} \tag{4.25}$$

Usando los resultados de (4.24), la ecuación (4.25) se puede escribir como:

$$\begin{aligned}
2\pi \frac{d^2}{dt^2} \langle |\mathbf{x}|^4(t) \rangle_{\text{rad}} + 2\pi\gamma \frac{d}{dt} \langle |\mathbf{x}|^4(t) \rangle_{\text{rad}} = 2\pi \frac{v_0^2}{2} \left[ \int_0^{\infty} r^4 \frac{\partial}{\partial r} P_0(r, t) dr + \right. \\
\left. \int_0^{\infty} r^5 \frac{\partial^2}{\partial r^2} P_0(r, t) dr \right]
\end{aligned} \tag{4.26}$$

Integrando la ecuación (4.26) va a quedar:

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle |\mathbf{x}|^4(t) \rangle_{\text{rad}} + \gamma \frac{d}{dt} \langle |\mathbf{x}|^4(t) \rangle_{\text{rad}} = \frac{v_0^2}{2} [-4\langle |\mathbf{x}|^2(t) \rangle_{\text{rad}} + 20\langle |\mathbf{x}|^2(t) \rangle_{\text{rad}}] \tag{4.27}$$

El cálculo para la ecuación (3.40) es muy similar. Lo que se tiene es:

$$\begin{aligned}
2\pi \frac{d^2}{dt^2} \langle |\mathbf{x}|^4(t) \rangle_{\text{rad}} + 2\pi\gamma \frac{d}{dt} \langle |\mathbf{x}|^4(t) \rangle_{\text{rad}} = \\
v_0^2 \int_0^t \phi(t-s) \left[ \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} r^4 \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) P_0(r, t) r dr d\varphi \right] ds
\end{aligned} \tag{4.28}$$

En el Apéndice A se muestra que:

$$\int_0^{\infty} Q(r) r^4 dr = 0. \tag{4.29}$$

Por lo tanto, de las ecuaciones (4.27) y de (4.28) para condiciones de simetría circular se obtienen las siguientes ecuaciones diferenciales ordinarias:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2} \langle |\mathbf{x}|^4(t) \rangle_{\text{rad}} + \gamma \frac{d}{dt} \langle |\mathbf{x}|^4(t) \rangle_{\text{rad}} &= 8v_0^2 \langle |\mathbf{x}|^2(t) \rangle_{\text{rad}}, \\ \frac{d^2}{dt^2} \langle |\mathbf{x}|^4(t) \rangle_{\text{rad}} + \gamma \frac{d}{dt} \langle |\mathbf{x}|^4(t) \rangle_{\text{rad}} &= 4^2 v_0^2 \int_0^t \phi(t-s) \langle |\mathbf{x}|^2(s) \rangle_{\text{rad}} ds. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Como se muestra en el Apéndice A, el término inhomogéneo  $Q(\mathbf{x})$  de la ecuación (3.40) no contribuye para el caso en el que al tiempo  $t = 0$ , todas las partículas se encuentran en el origen.

Al integrar las ecuaciones de (4.30) obtenemos:

$$\begin{aligned} \langle |\mathbf{x}|^4(t) \rangle_{\text{rad}} &= 8v_0^2 \int_0^t ds e^{-\gamma(t-s)} \int_0^s ds' \langle |\mathbf{x}|^2(s') \rangle_{\text{rad}}, \\ \langle |\mathbf{x}|^4(t) \rangle_{\text{rad}} &= 4^2 v_0^2 \int_0^t ds e^{-\gamma(t-s)} \int_0^s ds' \int_0^{s'} ds'' \phi(s' - s'') \langle |\mathbf{x}|^2(s'') \rangle_{\text{rad}} \end{aligned} \quad (4.31)$$

respectivamente. Sustituyendo (4.15) en las ecuaciones (4.31) e integrando se obtienen las siguientes ecuaciones usando la expresión (4.21):

$$\kappa_3 = 8 [\gamma^2 t^2 - 2\gamma t (2 + e^{-\gamma t}) + 6 (1 - e^{-\gamma t})] [\gamma t - (1 - e^{-\gamma t})]^{-2}, \quad (4.32a)$$

$$\begin{aligned} \kappa_5 &= 8 \left[ \gamma^2 t^2 - 5\gamma t \left( \frac{3}{4} + \frac{1}{3} e^{-\gamma t} \right) + \left( \frac{87}{16} - \frac{49}{9} e^{-\gamma t} + \frac{1}{12^2} e^{-4\gamma t} \right) \right] \\ &\times [\gamma t - (1 - e^{-\gamma t})]^{-2}, \end{aligned} \quad (4.32b)$$

en donde el subíndice de  $\kappa_3$  y  $\kappa_5$  denota el número de modos de Fourier que se tomaron en cuenta en la aproximación.

Los resultados son comparados con la solución numérica de  $\kappa$  en la Figura 4.2 y se puede apreciar que la curtosis de todas las distribuciones tiende a  $\kappa \rightarrow 8$  cuando  $\gamma t \rightarrow \infty$ , la cual corresponde a la curtosis de una distribución gaussiana. Pero lo importante de la gráfica es que para tiempos pequeños  $\gamma t \ll 1$ , una diferencia es notable entre ambas aproximaciones. Para la ecuación del telegrafista (3.27) la curtosis tiene un valor límite de  $\frac{8}{3}$ , valor que coincide con el valor para la ecuación de onda en dos dimensiones y corresponde a la gráfica de color verde en la Figura 4.2. Para nuestras simulaciones numéricas,

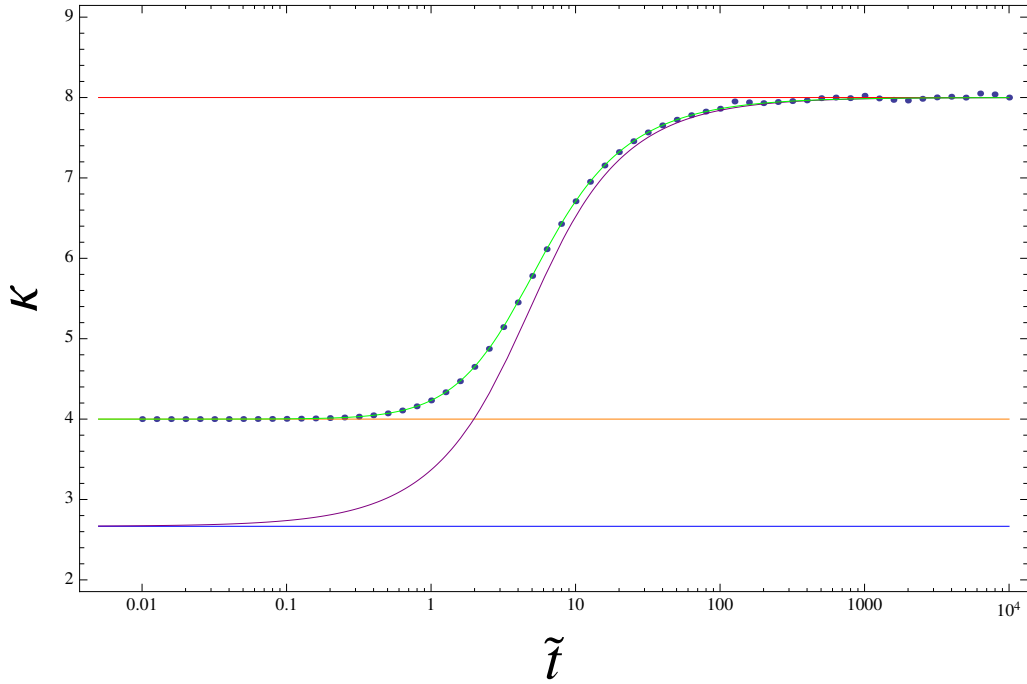


Figura 4.2: Curtosis  $\kappa$  para las soluciones circularmente simétricas de la ecuación del telegrafista (3.27) (línea continua púrpura), nuestra generalización de la misma (3.40) (línea continua verde) y la solución exacta obtenida de las simulaciones numéricas de las ecuaciones (3.1) (datos graficados con puntos) *vs*  $t\gamma = \tilde{t}$ . Los límites importantes (tanto para tiempos largos como para tiempos cortos) están marcados con líneas continuas horizontales en los valores 8, 4 y  $\frac{8}{3} \simeq 2.6667$  que corresponden a los valores de  $\kappa$  para distribuciones en dimensión 2 de los siguientes casos: la distribución gaussiana, la distribución de partículas que se mueven con rapidez constante y para soluciones circularmente simétricas de la ecuación de onda, respectivamente. Las soluciones numéricas se llevaron a cabo promediando  $10^5$  trayectorias de simulaciones de las ecuaciones (3.1) e integrando sobre  $2 \times 10^6$  pasos de tiempo.

la dependencia de la curtosis de las partículas brownianas que se mueven con rapidez constante adquiere un valor igual a 4 para tiempos cortos (ver la gráfica hecha con puntos en la Figura 4.2) y coincide con la curtosis para la distribución que es solución a la ecuación generalizada del telegrafista (3.40) para todos los tiempos.

### 4.3. Corroboración experimental

Contando con el análisis de las primeras dos aproximaciones, uno se pregunta si estos resultados se podrían reproducir experimentalmente. Para ello hay que mencionar que actualmente se llevan a cabo experimentos que estudian la movilidad intracelular utilizando la dinámica de partículas activas hechas artificialmente. Ejemplos de esto son partículas de oro coloidales microinyectadas [?], partículas de Janus autopropulsadas [?] o micronadadores artificiales inspirados en células y bacterias móviles [?,?]. Estos sistemas han sido estudiados en términos del comportamiento de los cumulantes de segundo y cuarto orden, teniendo a la video-microscopía nanométrica como una herramienta muy útil.

Si un investigador experimental quisiera corroborar nuestros resultados teóricos del desplazamiento cuadrático medio y la curtosis, debe tomar en cuenta algunas características al momento de preparar su sistema de partículas autopropulsadas:

- (i) Antes que nada se debe asegurar que las condiciones iniciales experimentales coincidan lo más posible con nuestras condiciones iniciales teóricas, lo cual significa que las partículas deben comenzar todas en la misma ubicación espacial.
- (ii) Se necesita también que los agentes activos tengan una velocidad constante, o al menos desviaciones muy pequeñas de un valor constante y además los efectos de interacción deben de ser despreciables.
- (iii) La simetría de las partículas es también una característica importante. Dado que en nuestro modelo no existe ningún ángulo o dirección preferencial, las partículas en el experimento tampoco deben tenerlo. Lo ideal es que éstas fueran esféricas para poder obtener gráficas como las nuestras. La importancia de la simetría de las partículas se ha estudiado recientemente por Wensink et. al [?]. En este trabajo se observó cómo violaciones muy pequeñas a la forma y simetría de las partículas puede llevar a modos fundamentalmente diferentes de movimiento activo.



## 4.4. Comparación en el espacio de Fourier

Para finalizar este capítulo queremos comparar las densidades de probabilidad obtenidas no en el espacio de coordenadas, sino mas bien en el espacio de Fourier, ya que el sistema de ecuaciones (3.21) se puede resolver numéricamente fácil para cuando se tienen 3 o 5 modos . Debido al término cinético que aparece en (3.27) y (3.40) y la simetría en las condiciones iniciales, las respectivas soluciones tienen una dependencia simple de la magnitud del vector de onda  $k = |\mathbf{k}|$ .

Vemos que en el régimen de tiempos cortos, que corresponde a la Figura (4.3a), la solución a la ecuación del telegrafista (3.27) tiene un comportamiento más cercano a la solución normalizada de la ecuación de onda en 2 dimensiones, que es la siguiente:

$$\tilde{P}_{\text{onda}}(k, t) = \cos\left(\frac{v_0 kt}{\sqrt{2}}\right). \quad (4.33)$$

Por eso, en este régimen de tiempos, la solución a la ecuación del telegrafista en el espacio de Fourier, que es

$$\begin{aligned} \tilde{P}_{\text{telegrafista}}(k, t) &= \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4\sqrt{\frac{1}{4} - \frac{v_0^2 k^2}{2\gamma^2}}}\right) e^{t\gamma\left(-\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{v_0^2 k^2}{2\gamma^2}}\right)} \\ &+ \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{4\sqrt{\frac{1}{4} - \frac{v_0^2 k^2}{2\gamma^2}}}\right) e^{t\gamma\left(-\frac{1}{2} - \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{v_0^2 k^2}{2\gamma^2}}\right)}, \end{aligned} \quad (4.34)$$

hereda las características de (4.33). Esto es claro una vez que se reescribe la ecuación (4.34) de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \tilde{P}_{\text{telegrafista}}(k, t) &= e^{-\frac{t\gamma}{2}} \left\{ \frac{1}{2} \left( e^{t\gamma\sqrt{\frac{1}{4} - \frac{v_0^2 k^2}{2\gamma^2}}} + e^{-t\gamma\sqrt{\frac{1}{4} - \frac{v_0^2 k^2}{2\gamma^2}}} \right) + \right. \\ &\quad \left. \frac{i}{2\sqrt{\frac{1}{4} - \frac{v_0^2 k^2}{2\gamma^2}}} \frac{1}{2i} \left( e^{t\gamma\sqrt{\frac{1}{4} - \frac{v_0^2 k^2}{2\gamma^2}}} - e^{-t\gamma\sqrt{\frac{1}{4} - \frac{v_0^2 k^2}{2\gamma^2}}} \right) \right\} \\ &= e^{-\frac{t\gamma}{2}} \left\{ \cos\left(t\gamma\sqrt{\frac{v_0^2 k^2}{2\gamma^2} - \frac{1}{4}}\right) + \frac{i \sin\left(t\gamma\sqrt{\frac{v_0^2 k^2}{2\gamma^2} - \frac{1}{4}}\right)}{2\sqrt{\frac{1}{4} - \frac{v_0^2 k^2}{2\gamma^2}}} \right\} \end{aligned}$$

(4.35)

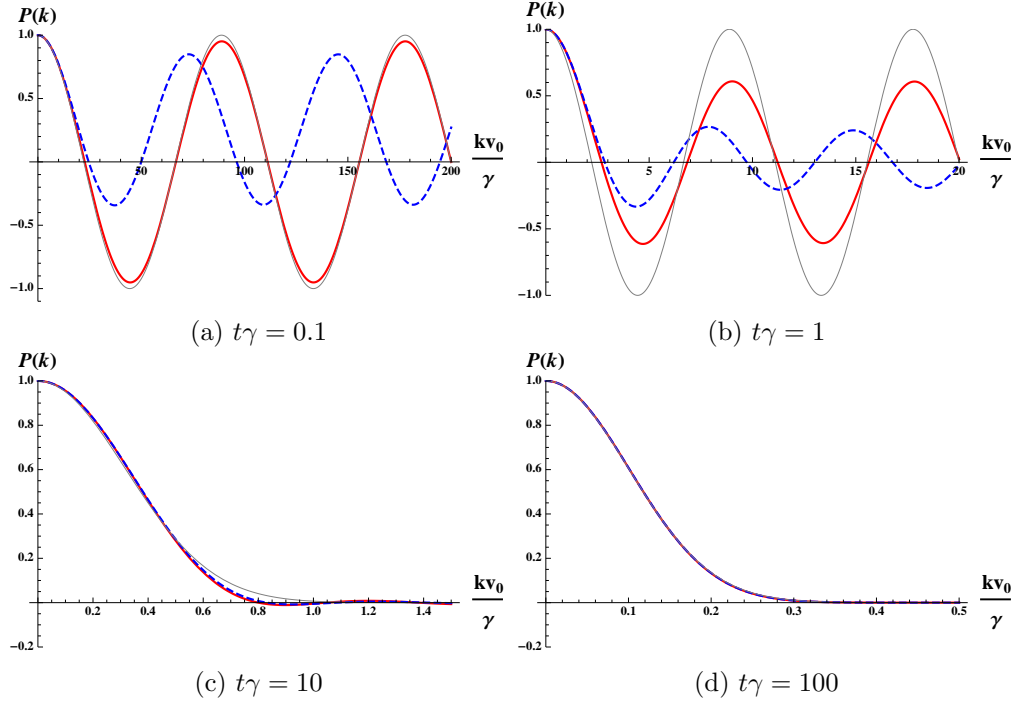


Figura 4.3: Las líneas en color son las gráficas de la densidad de probabilidad  $\tilde{P}_0(k, t)$  como función de  $k = |\mathbf{k}|$  a cuatro tiempos diferentes:  $\gamma t = 0.1$ ,  $\gamma t = 1.0$ ,  $\gamma t = 10.0$ , y  $\gamma t = 100.0$  en las figuras (a), (b), (c) and (d), respectivamente. La gráfica punteada en azul corresponde a la solución de la ecuación generalizada del telegrafista (3.40), mientras que la gráfica roja corresponde a la solución de la ecuación del telegrafista en dos dimensiones (3.27). La gráfica en gris en las figuras (a) y (b) corresponde a la solución normalizada de la ecuación de onda en 2 dimensiones con velocidad de propagación  $v_0\sqrt{2}$  (4.33). La gráfica en gris en las figuras (c) y (d) corresponde a la solución a la ecuación de difusión, que es una gaussiana.

En la Figura 4.3 se puede ver que la solución a (3.40) (gráfica punteada en color azul) difiere mucho del comportamiento ondulatorio y mejora la descripción de partículas que se mueven con rapidez constante, como lo muestran los análisis en términos del DCM y la curtosis.

En la misma figura se aprecia que al tiempo  $\gamma t = 1$  (4.3b), ambas aproximaciones comienzan a diferir menos y de esta manera la solución a la ecuación del telegrafista deja de tener un comportamiento ondulatorio. Para tiempos

más largos ( $\gamma t = 10, 100$ ), cuyas gráficas se muestran en las figuras (4.3c) y (4.3d), las dos aproximaciones no difieren y se acercan a tener un comportamiento difusivo de la forma

$$\tilde{P}_{diffusion}(k, t) = e^{-\frac{tv_0^2 k^2}{2\gamma}}, \quad (4.36)$$

en donde es claro que la constante de difusión en (4.36) es  $\frac{v_0^2}{2\gamma}$ .



# 5

## Conclusiones

En este trabajo se llevó a cabo un estudio de un sistema de agentes brownianos con rapidez constante sin interacción. Dado que el sistema está descrito por ecuaciones tipo Langevin, su estudio se ve bien complementado con la obtención de la ecuación de Fokker–Planck correspondiente para la función de densidad de probabilidad. El poder hacer esto nos permitió comparar nuestros resultados con trabajos previos en el área de transporte de materia. Nos enfocamos en el problema de la generalización de la ecuación del telegrafista, planteada por [?], a más de una dimensión, en este caso a dos dimensiones espaciales.

Los trabajos previos que se realizaron partían de plantear las ecuaciones en redes discretas, lo cual conllevaba a la obtención de ecuaciones de Fokker–Planck de orden muy alto, tanto en las coordenadas espaciales, como en la coordenada temporal. A nuestro parecer, este tipo de acercamiento al problema dificulta la intuición física, ya que ecuaciones diferenciales de orden cuarto o mayores son poco comunes en la física y además de eso, la forma de una ecuación de este tipo no permite identificar los términos en la misma. Es decir, al ver una ecuación de este tipo no se puede reconocer fácilmente qué papel juega cada término y tampoco se puede comparar con ecuaciones bien conocidas, como la ecuación de onda o la ecuación de difusión. Por eso nos dimos a la tarea de sustituir el formalismo por uno tipo Langevin. De esta manera logramos obtener un sistema infinito completo de ecuaciones diferenciales acopladas que resuelven el sistema. Utilizando un mecanismo de truncamiento se pudieron obtener dos aproximaciones. La primera aproximación corresponde a la ecuación del telegrafista. La segunda es una nueva ecuación que generaliza a la anteriormente mencionada. En esta ecuación aparecen términos de memoria.

El estudio de las soluciones de ambas aproximaciones mediante el DCM y la curtosis arrojó que el segundo momento era demasiado robusto como para poder distinguir diferencias entre las aproximaciones, mientras que la curtosis sí lo hace. Esto expresa que la curtosis nos da otra información acerca de la forma de las distribuciones. Aunado al cálculo de los cumulantes, se hizo también una comparación en el espacio de Fourier la cual nos permitió entender la similitud de las soluciones a tiempos cortos y largos comparada con las soluciones balística y difusiva.

El análisis nos llevó a concluir que nuestra aproximación con cinco modos es definitivamente una mejor aproximación que la ecuación del telegrafista en el régimen de tiempos cortos. La estructura de la ecuación permite comparar con la ecuación del telegrafista y se aprecia que aparece una función de memoria en el término cinético de la misma, volviendo al proceso no markoviano. El que el proceso se haya vuelto no markoviano es consecuencia de haber decidido prescindir de la información sobre el ángulo en la distribución de probabilidad. Esto pasa en general cuando se calcula la marginal de una variable en un proceso, mas no es una regla. También podemos decir que pudimos encontrar un sistema de ecuaciones que, de poder resolverse, nos da la solución exacta al problema. La dificultad radica en poder diagonalizar adecuadamente una matriz infinita. Éste es un detalle pendiente que se puede abordar en el futuro.

Por otro lado también podemos concluir que nuestro modelo admite generalizaciones de índole probabilística. Un ejemplo es sustituir ruido de color en lugar de ruido blanco. De esta manera, el modelo cambiaría y se podría aplicar a sistemas biológicos diferentes. Esta generalización conllevaría a usar una versión más complicada del Teorema de Novikov. Otra generalización que se puede hacer es cambiar las condiciones iniciales. Se podría utilizar, por ejemplo, condiciones iniciales con un ángulo preferencial:  $P(\mathbf{x}, \varphi, 0) = \delta^{(2)}(\mathbf{x})\delta(\varphi - \varphi_0)$ . Estos también son posibles trabajos futuro que podrían arrojar resultados interesantes.

El formalismo también permite un enfoque un poco diferente relacionado con la función de memoria obtenida en la generalización de la ecuación del telegrafista. Es decir, uno podría preguntarse ¿para cuáles funciones de memoria  $\phi(s)$  se puede resolver la ecuación (3.40)? Nuestra hipótesis es que ecuaciones tan generales como las funciones Mittag-Leffler pueden tener cabida en dichas soluciones. Lo interesante sería poder asociar un sistema físico real a tales ecuaciones y estudiarlos.

De esta manera consideramos que el trabajo realizado a lo largo de esta tesis

es una semilla que, no conforme con ya haber dado resultados interesantes, tiene muchas posibles generalizaciones y estamos seguros que aportará mucho al estudio de sistemas de agentes activos.





# Apéndices



# Apéndice A

## Momentos del término $Q(\mathbf{x})$

### A.1. Segundo momento

En este apéndice se calcularán el segundo y el cuarto momento del término inhomogéneo  $Q(\mathbf{x})$ , que se define en (3.42). Si suponemos simetría circular inicial para la distribución  $P(\mathbf{x}, \varphi, t)$ , entonces podemos escribir a esta densidad de la forma:

$$P(\mathbf{x}, \varphi, 0) = \frac{1}{(2\pi)^2} \mathcal{X}(x), \quad (\text{A.1})$$

en donde  $x = |\mathbf{x}|$ . Con esta simplificación es inmediato que la ecuación (3.42) se reduce a la ecuación:

$$Q(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2\pi} \left[ \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} \left( x \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] \mathcal{X}(x), \quad (\text{A.2})$$

ya que los términos con los coeficientes exponenciales

$$\int_0^{2\pi} e^{\pm i2\varphi} d\varphi \quad (\text{A.3})$$

se hacen cero debido a la periodicidad en el ángulo  $\varphi$ .

Ahora si podemos calcular el factor

$$\beta = \int \mathbf{x}^2 Q(\mathbf{x}) d^2 \mathbf{x} \quad (\text{A.4})$$

que aparece en el cálculo del DCM de la segunda aproximación, que es la ecuación (4.9b). En el caso de simetría circular, calcular (A.4) se resume a calcular

$$\beta = - \int_0^\infty x^2 \left[ \frac{\partial \mathcal{X}(x)}{\partial x} + x \frac{\partial^2 \mathcal{X}(x)}{\partial x^2} \right] dx. \quad (\text{A.5})$$

La expresión resulta de usar al operador laplaciano en coordenadas polares

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}. \quad (\text{A.6})$$

Integrando la ecuación (A.5) por partes y usando condiciones de frontera

$$\begin{aligned} \mathcal{X}(x) |_{x=\infty} &= 0, \\ \frac{\partial \mathcal{X}(x)}{\partial x} |_{x=\infty} &= 0, \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

llegamos a la siguiente expresión:

$$\beta = 2 \int_0^\infty x^2 \frac{\partial \mathcal{X}(x)}{\partial x} dx. \quad (\text{A.8})$$

Integrando (A.8) por partes de nuevo y usando que

$$\int x \mathcal{X}(x) dx = 1 \quad (\text{A.9})$$

se obtiene el resultado final, que nos dice el valor de  $\beta$  para cuando se usan condiciones iniciales para la distribución  $P(\mathbf{x}, \varphi, t)$ :

$$\beta = -4. \quad (\text{A.10})$$

## A.2. Cuarto momento

Siguiendo un procedimiento análogo, se llega a que el cuarto momento está dado por

$$\int_0^\infty x^4 \left[ \frac{\partial \mathcal{X}(x)}{\partial x} + x \frac{\partial^2 \mathcal{X}(x)}{\partial x^2} \right] dx = 2^4 \int_0^\infty x^3 \mathcal{X}(x) dx. \quad (\text{A.11})$$

Es claro que la ecuación (A.11) vale cero para condiciones iniciales de la forma

$$\mathcal{X}(x) = \frac{1}{x} \delta(x), \quad (\text{A.12})$$

el cual es nuestro caso de estudio.



## Apéndice B

### Aproximación a la ecuación (3.42)

La solución a la ecuación generalizada del telegrafista en el dominio de Fourier-Laplace dada por la expresión (3.43) se puede calcular invirtiendo la función de Green:

$$\begin{aligned}\widehat{G}(k, \epsilon) &= \frac{1}{\epsilon^2 + \gamma\epsilon + v_0^2 k^2 \left( \frac{3}{4} - \frac{\gamma}{\epsilon + 4\gamma} \right)} \\ \widehat{G}(k, \epsilon) &\xrightarrow{\epsilon \ll 4\gamma} \frac{1}{\epsilon^2 + \gamma_k \epsilon + \frac{v_0^2 k^2}{2}},\end{aligned}\tag{B.1}$$

en donde se usó la notación

$$\gamma_k \equiv \left( 1 + \frac{v_0^2 k^2}{2^4 \gamma^2} \right) \gamma\tag{B.2}$$

y se usó también la forma explícita de  $\hat{\phi}(\epsilon)$ , que es

$$\hat{\phi}(\epsilon) = \frac{3}{4} - \frac{\gamma}{\epsilon + 4\gamma}.\tag{B.3}$$

Lo que se hace ahora es definir la frecuencia en dependencia de  $k$  de la siguiente manera

$$\omega_k^2 \equiv \frac{v_0^2 k^2}{2} - \left( \frac{\gamma_k}{2} \right)^2\tag{B.4}$$

para así poder llevar a cabo la inversión en la transformada de Laplace y entonces (B.1) va a estar dada por

$$\tilde{G}(k, t) \approx \frac{e^{-\frac{\gamma_k t}{2}}}{\omega_k} \sin(\omega_k t) \quad (\text{B.5})$$

para  $4\gamma t \gg 1$ . Esta aproximación a la función de Green generaliza la correspondiente a la ecuación del telegrafista, la cual se obtiene utilizando el valor  $k = 0$  en  $\gamma_k$  y que resulta ser

$$\tilde{G}^0(k, t) = e^{-\gamma t/2} \frac{\sin(\omega_{0k} t)}{\omega_{0k}}, \quad (\text{B.6})$$

en donde se ha usado la siguiente notación:

$$\gamma = \gamma_{k=0} \quad (\text{B.7})$$

$$\omega_{0k} = \frac{v_0^2 k^2}{2} - \left(\frac{\gamma}{2}\right)^2. \quad (\text{B.8})$$

Si usamos (B.5) obtenemos que la densidad  $\tilde{P}_0(\mathbf{k}, t)$  en el espacio de Fourier tiene la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \tilde{P}_0(\mathbf{k}, t) \approx & \frac{e^{-\gamma_k t/2}}{\omega_k} \left[ \omega_k \cos \omega_k t + \left( \gamma - \frac{\gamma_k}{2} \right) \sin \omega_k t \right] \tilde{P}_0(\mathbf{k}, 0) \\ & + \frac{v_0^2}{4} \tilde{Q}(\mathbf{k}) \frac{e^{-\gamma_k t/2}}{\omega_k} \frac{e^{-(4\gamma - \gamma_k/2)t} \omega_k - \omega_k \cos \omega_k t + (4\gamma - \frac{\gamma_k}{2}) \sin \omega_k t}{\left(\frac{\gamma_k}{2} - 4\gamma\right)^2 + \omega_k^2}. \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

La inversión analítica de (B.9) parece imposible de hacer dado que aparece un término  $k^4$  en  $\omega_k$ , pero se puede aproximar en el régimen de  $k$  pequeña (que se traduce a  $x$  grande). En dicho régimen se tiene que a primer orden en  $\frac{v_0^2 k^2}{2^4 \gamma^2} \ll 1$ ,

$$\omega_k^2 \approx \left( \frac{v_0^2 k^2}{2} \right) (1 - 2^{-4}) - \left( \frac{\gamma}{2} \right)^2. \quad (\text{B.10})$$

Con estas consideraciones, la función de Green se puede aproximar por



$$e^{-v_0^2 k^2 t / 2^4 \gamma} \tilde{G}^0(k', t), \quad (\text{B.11})$$

en donde  $k' = \frac{\sqrt{15}k}{2^2}$ . De esta manera, la función de Green de la ecuación generalizada del telegrafista en el espacio de coordenadas se puede escribir como:

$$G(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{4\pi D' t} \int e^{-(\mathbf{x}-\mathbf{x}')/4D't} G^0(\mathbf{x}', t) d\mathbf{x}' \quad (\text{B.12})$$

con  $D' = \frac{v_0^2}{2^4 \gamma}$ .

Por otro lado, para tiempos cortos, la expresión (3.43) se puede aproximar por

$$\hat{P}_0(\mathbf{k}, \epsilon) = \frac{\epsilon \tilde{P}_0(\mathbf{k}, 0)}{\epsilon^2 + \frac{3}{4}v_0^2 k^2} + \frac{v_0^2}{4} \frac{\tilde{Q}(\mathbf{k})}{\epsilon^2 + \frac{3}{4}v_0^2 k^2}. \quad (\text{B.13})$$

Al invertir (B.13) en Laplace se obtiene:

$$\tilde{P}_0(\mathbf{k}, t) = \tilde{P}_0(\mathbf{k}, 0) \left[ \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}v_0 k t\right) + \frac{2}{3} \sin^2\left(\frac{\sqrt{3}}{4}v_0 k t\right) \right], \quad (\text{B.14})$$

en donde se ha supuesto simetría rotacional para escribir

$$\tilde{Q}(\mathbf{k}) = k^2 \tilde{P}_0(\mathbf{k}, t). \quad (\text{B.15})$$

El último paso es directo y requiere verificar que (B.14) satisface la ecuación de onda inhomogénea siguiente:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} P_0(\mathbf{x}, t) = \frac{3}{4}v_0^2 \nabla^2 P_0(\mathbf{x}, t) + \frac{v_0^2}{4} Q(\mathbf{x}). \quad (\text{B.16})$$



# Apéndice C

## Derivación de la ecuación (3.39)

Para poder derivar cómodamente la ecuación generalizada del telegrafista (3.40) reescribiré el sistema de ecuaciones (3.39) de la siguiente forma:

$$\frac{d}{dt}\tilde{p}_2(\mathbf{k}, t) = a e^{3\gamma t}\tilde{p}_1(\mathbf{k}, t) \quad (\text{C.1a})$$

$$\frac{d}{dt}\tilde{p}_1(\mathbf{k}, t) = a e^{\gamma t}\tilde{p}_0(\mathbf{k}, t) + b e^{-3\gamma t}\tilde{p}_2(\mathbf{k}, t) \quad (\text{C.1b})$$

$$\frac{d}{dt}\tilde{p}_0(\mathbf{k}, t) = a e^{-\gamma t}\tilde{p}_{-1}(\mathbf{k}, t) + b e^{-\gamma t}\tilde{p}_1(\mathbf{k}, t) \quad (\text{C.1c})$$

$$\frac{d}{dt}\tilde{p}_{-1}(\mathbf{k}, t) = a e^{-3\gamma t}\tilde{p}_{-2}(\mathbf{k}, t) + b e^{\gamma t}\tilde{p}_0(\mathbf{k}, t) \quad (\text{C.1d})$$

$$\frac{d}{dt}\tilde{p}_{-2}(\mathbf{k}, t) = b e^{3\gamma t}\tilde{p}_{-1}(\mathbf{k}, t), \quad (\text{C.1e})$$

en donde

$$\begin{aligned} a &= -\frac{v_0}{2}(ik_x + k_y) \\ b &= -\frac{v_0}{2}(ik_x - k_y) \\ a^2 &= \frac{v_0^2}{4}(-k_x^2 + 2ik_x k_y + k_y^2) \\ b^2 &= \frac{v_0^2}{4}(-k_x^2 - 2ik_x k_y + k_y^2) \\ ab &= -\frac{v_0^2}{4}(k_x^2 + k_y^2). \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

Si derivo (C.1c) una vez con respecto al tiempo me va a quedar:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2}\tilde{p}_0 &= -\gamma e^{-\gamma t} a \tilde{p}_{-1} + e^{-\gamma t} a \frac{d}{dt}\tilde{p}_{-1} + e^{-\gamma t} b \frac{d}{dt}\tilde{p}_1 - \gamma e^{-\gamma t} b \tilde{p}_1 \\ \Rightarrow \frac{d^2}{dt^2}\tilde{p}_0 + \gamma [e^{-\gamma t} a \tilde{p}_{-1} + e^{-\gamma t} b \tilde{p}_1] &= e^{-\gamma t} \left[ a \frac{d}{dt}\tilde{p}_{-1} + b \frac{d}{dt}\tilde{p}_1 \right] \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

Si utilizamos las ecuaciones (C.1b), (C.1c) y (C.1d) nos va a quedar:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2}\tilde{p}_0 + \gamma \frac{d}{dt}\tilde{p}_0 &= e^{-\gamma t} \left[ a (e^{-3\gamma t} a \tilde{p}_{-2} + e^{\gamma t} b \tilde{p}_0) + \right. \\ &\quad \left. b (e^{\gamma t} a \tilde{p}_0 + e^{-3\gamma t} b \tilde{p}_2) \right] \\ &= 2ab\tilde{p}_0 + a^2 e^{-4\gamma t} \tilde{p}_{-2} + b^2 e^{-4\gamma t} \tilde{p}_2 \\ &= -\frac{v_0^2}{2} (k_x^2 + k_y^2) \tilde{p}_0 + e^{-4\gamma t} [a^2 \tilde{p}_{-2} + b^2 \tilde{p}_2]. \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

Para poder seguir con el cálculo de (C.4) se deben de integrar las ecuaciones (C.1a) y (C.1e):

$$\tilde{p}_2(\mathbf{k}, t) = \tilde{p}_2(\mathbf{k}, 0) + a \int_0^t e^{3\gamma s} \tilde{p}_1(\mathbf{k}, s) ds, \quad (\text{C.5})$$

$$\tilde{p}_{-2}(\mathbf{k}, t) = \tilde{p}_{-2}(\mathbf{k}, 0) + b \int_0^t e^{3\gamma s} \tilde{p}_{-1}(\mathbf{k}, s) ds. \quad (\text{C.6})$$

De esta manera podemos sustituir (C.5) y (C.6) en (C.4) y va a quedar:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2}\tilde{p}_0 + \gamma \frac{d}{dt}\tilde{p}_0 &= -\frac{v_0^2}{2} (k_x^2 + k_y^2) \tilde{p}_0 + e^{-4\gamma t} \left[ a^2 \left( \tilde{p}_{-2}(\mathbf{k}, 0) + b \int_0^t e^{3\gamma s} \tilde{p}_{-1}(\mathbf{k}, s) ds \right) \right. \\ &\quad \left. + b^2 \left( \tilde{p}_2(\mathbf{k}, 0) + a \int_0^t e^{3\gamma s} \tilde{p}_1(\mathbf{k}, s) ds \right) \right] \\ &= -\frac{v_0^2}{2} (k_x^2 + k_y^2) \tilde{p}_0 + e^{-4\gamma t} (a^2 \tilde{p}_{-2}(\mathbf{k}, 0) + b^2 \tilde{p}_2(\mathbf{k}, 0)) \\ &\quad + e^{-4\gamma t} ab \int_0^t e^{4\gamma s} [a e^{-\gamma s} \tilde{p}_{-1}(\mathbf{k}, s) + b e^{-\gamma s} \tilde{p}_1(\mathbf{k}, s)] ds. \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

Aquí volvemos a utilizar la ecuación (C.1c) para sustituirla en el término donde está la integral y nos va a quedar:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2}\tilde{p}_0 + \gamma \frac{d}{dt}\tilde{p}_0 = & -\frac{v_0^2}{2}(k_x^2 + k_y^2)\tilde{p}_0 + e^{-4\gamma t} (a^2\tilde{p}_{-2}(\mathbf{k}, 0) + b^2\tilde{p}_2(\mathbf{k}, 0)) \\ & + e^{-4\gamma t} ab \int_0^t e^{4\gamma s} \frac{d}{dt}\tilde{p}_0(\mathbf{k}, s) ds. \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

Calculo por separado la integral de la ecuación (C.8) para que sea más fácil. Si se integra por partes se va a tener:

$$\begin{aligned} \int_0^t e^{4\gamma s} \frac{d}{dt}\tilde{p}_0(\mathbf{k}, s) ds = & e^{4\gamma s}\tilde{p}_0(\mathbf{k}, s) \Big|_0^t - 4\gamma \int_0^t e^{4\gamma s}\tilde{p}_0(\mathbf{k}, s) ds \\ = & e^{4\gamma t}\tilde{p}_0(\mathbf{k}, t) - \tilde{p}_0(\mathbf{k}, 0) - 4\gamma \int_0^t e^{4\gamma s}\tilde{p}_0(\mathbf{k}, s) ds. \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

Sustituyendo (C.9) en (C.8) se llega a que:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2}\tilde{p}_0 + \gamma \frac{d}{dt}\tilde{p}_0 = & -\frac{v_0^2}{2}(k_x^2 + k_y^2)\tilde{p}_0 - \frac{v_0^2}{4}(k_x^2 + k_y^2)\tilde{p}_0 \\ & + e^{-4\gamma t} (a^2\tilde{p}_{-2}(\mathbf{k}, 0) + b^2\tilde{p}_2(\mathbf{k}, 0) - ab\tilde{p}_0(\mathbf{k}, 0)) \\ & + \frac{v_0^2}{4}(k_x^2 + k_y^2)4\gamma e^{-4\gamma t} \int_0^t e^{4\gamma s}\tilde{p}_0(\mathbf{k}, s) ds \\ \Rightarrow \frac{d^2}{dt^2}\tilde{p}_0 + \gamma \frac{d}{dt}\tilde{p}_0 = & -\frac{3v_0^2}{4}(k_x^2 + k_y^2)\tilde{p}_0(\mathbf{k}, t) + v_0^2\gamma(k_x^2 + k_y^2) \int_0^t e^{-4\gamma(t-s)}\tilde{p}_0(\mathbf{k}, s) ds \\ & + \frac{v_0^2}{4}e^{-4\gamma t} \left[ (ik_x + k_y)^2\tilde{p}_{-2}(\mathbf{k}, 0) + (ik_x - k_y)^2\tilde{p}_2(\mathbf{k}, 0) \right. \\ & \left. + (k_x^2 + k_y^2)\tilde{p}_0(\mathbf{k}, 0) \right]. \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

Usando la transformada inversa de Fourier va a quedar:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2}\tilde{p}_0(\mathbf{x}, t) + \gamma \frac{d}{dt}\tilde{p}_0(\mathbf{x}, t) = & \frac{3v_0^2}{4}\nabla^2\tilde{p}_0(\mathbf{x}, t) - v_0^2\gamma \int_0^t e^{-4\gamma(t-s)}\nabla^2\tilde{p}_0(\mathbf{k}, t) ds \\ & + \frac{v_0^2}{4}e^{-4\gamma t} \int_0^{2\pi} \left[ e^{i2\varphi}(\partial_x + i\partial_y)^2 + e^{-i2\varphi}(\partial_x - i\partial_y)^2 - (\partial_x^2 + \partial_y^2) \right] P(\mathbf{x}, \varphi, 0) d\varphi. \end{aligned}$$

(C.11)

Con la derivación anterior queda demostrado que partiendo del sistema de ecuaciones (C.1) se llega a la ecuación del telegrafista generalizada (3.40).