



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

DIFUSIÓN EFECTIVA EN SISTEMAS DE MATERIA ACTIVA DILUIDA

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

PRESENTA:
ENRIQUE PUGA CITAL

DR. ALEJANDRO VÁSQUEZ ARZOLA
INSTITUTO DE FÍSICA, UNAM

DR. FRANCISCO JAVIER SEVILLA PÉREZ
INSTITUTO DE FÍSICA, UNAM

DR. DENIS PIERRE BOYER
INSTITUTO DE FÍSICA, UNAM

CIUDAD DE MÉXICO, ABRIL 2017



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.

Dedicado a mis padres

Agradecimientos

A mis padres, Enrique Puga y Maria Luisa Cital López por su extraordinario esfuerzo y apoyo incondicional en cada uno de los sueños y metas que me he propuesto.

A mis asesores Alejandro Vásquez y Francisco Sevilla que fueron unos extraordinarios guías durante el desarrollo de la presente tesis.

A los amigos que conseguí en esta etapa de mi vida y que me acompañaron en los momentos más bajos y altos de la misma.

A los excelentes profesores que me hicieron maravillarme y hacerme sentir que había tomado la decisión correcta al tomar el camino de la Física.

Resumen

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

Abstract

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

Índice general

Agradecimientos	III
Resumen	V
Abstract	VII
Índice de Figuras	XI
1. Introducción	1
2. Marco teórico	7
2.1. Movimiento browniano pasivo	7
2.1.1. Antecedentes históricos	7
2.1.2. ¿Qué es el movimiento Browniano?	9
2.1.3. Ecuación de Langevin	11
2.1.4. Ecuación de Fokker-Planck	14
2.1.5. Teorema de fluctuación-disipación	20
2.1.6. Equilibrio local	25
2.2. Movimiento browniano activo	32
2.2.1. Fricción dependiente de la velocidad	33
2.2.2. Modelo de depósito	35
2.3. Dinámica «run-and-tumble»	37
3. Difusión efectiva e inhomogeneidad	45
3.1. Conexión entre caso pasivo y activo: difusión efectiva	45
3.2. Análisis	49
3.3. Caso activo: «run-and-tumble»	50
3.4. Caso pasivo: ecuación de Langevin	53
3.5. Aplicación a potenciales característicos	54
3.5.1. Potencial lineal	55
3.5.2. Potencial armónico	57

3.5.3. Potencial de doble pozo	64
3.6. Distribuciones no-Boltzmann-Gibbs: inhomogeneidad	80
3.7. Difusión y temperatura efectiva	82
4. Conclusiones	85
A. Solución numérica ec. de Langevin	89
A.1. Código en Matlab	89

Índice de figuras

1.1.	Materia activa a nivel microscópico y macroscópico.	2
1.2.	Explicación esquemática del mecanismo de autopropulsión en un micro- nador: una partícula de Jano es iluminada calentando una de sus capas por encima de la temperatura crítica T_c induciendo con ello la separación de los recubrimientos siendo este el proceso que propulsa a la misma. [1]	3
1.3.	Proceso interno y externo en una partícula Browniana activa.	4
2.1.	Trayectoria irregular observada en una partícula Browniana. [2]	9
2.2.	Partícula Browniana (mesoscópica) bombardeada por las moléculas (mi- croscópicas) que conforman el medio circundante o baño térmico a una temperatura homogénea.	10
2.3.	Trayectoria de una partícula Browniana: (a) Observación a intervalos de 30 s. y (b) a intervalos de 10 s. [2]	11
2.4.	Fricción en función de la velocidad. Se observan los estadios de bombeo para el caso $ \gamma(\mathbf{v}) < 0$ y disipación para $ \gamma(\mathbf{v}) > 0$. [3]	34
2.5.	Trayectorias del tipo «run-and-tumble» seguidas por E. Coli vistas en un plano. Nótese el movimiento más persistente a diferencia del caso Browniano pasivo.[4]	41
2.6.	Trayectorias RT en un plano. En la mitad izquierda las bacterias no se encuentran sometidas a un potencial siendo aleatorio su movimiento, en la mitad derecha su dinámica se encuentra influida por un potencial del tipo quimiotáctico. [5]	42
2.7.	Modelo RT unidimensional.	42
3.1.	E. coli desplazándose ante la influencia del campo gravitacional.	55
3.2.	Potencial armónico visto desde un punto de vista cualitativo. Se indican los puntos de confinamiento y la longitud característica del sistema.	59
3.3.	Densidades de probabilidad de «equilibrio» para distintos valores del parámetro β	60
3.4.	Distribuciones de probabilidad para partículas Brownianas pasivas difun- diéndose en un medio inhomogéneo no isotérmico.	62

3.5. Distribuciones de probabilidad para partículas Brownianas difundándose en un medio inhomogéneo no isotérmico. Se contrasta el perfil de temperatura del medio con las distribuciones de probabilidad.	63
3.6. Comparación de las distribuciones de probabilidad obtenidas para partículas activas que exhiben patrones de movimiento RT y aquéllas para partículas pasivas moviéndose en un medio con temperatura inhomogénea.	64
3.7. Potencial de doble pozo ilustrando cualitativamente las cantidades involucradas en su descripción. Para $\eta \leq 1$ se muestra el desplazamiento libre entre ambos pozos de potencial. Cuando $\eta > 1$ la partícula el movimiento de la partícula se encuentra confinado a las regiones correspondientes a los pozos no pudiendo sobrepasar la barrera de energía ΔE	65
3.8. Dos tipos de regiones de movimiento dependiendo si la fuerza autopropulsiva es menor o mayor a la de atrapamiento.	68
3.9. Fuerza de atrapamiento en función del parámetro η . Aunque aquí no se muestra explícitamente la fuerza autopropulsiva es claro que para $\eta < 1$ ésta última sería mayor que las fuerzas de atrapamiento. Para $\eta = 2$ esto no se cumple y la fuerza autopropulsiva es menor a la de atrapamiento.	69
3.10. Conforme el valor de η aumenta, los mínimos del potencial se desplazan haciéndolo con ellos también las distribuciones de probabilidad.	72
3.11. Potencial de doble pozo normalizado.	72
3.12. Conforme el valor de η aumenta, los mínimos del potencial se desplazan haciéndolo con ellos también las distribuciones de probabilidad.	72
3.13. Distribuciones de probabilidad de «equilibrio» para $\eta = 0,5$ y valores crecientes de χ	74
3.14. Distribuciones de probabilidad de «equilibrio» para $\eta = 0,99$ y valores crecientes de χ	75
3.15. Distribuciones de probabilidad obtenidas con $\eta = 0,5$ y valores crecientes de χ para partículas Brownianas pasivas en un medio inhomogéneo no isotérmico.	76
3.16. Distribuciones de probabilidad obtenidas con $\eta = 0,99$ y valores crecientes de χ para partículas Brownianas pasivas en un medio inhomogéneo no isotérmico.	77
3.17. Contraste entre el perfil de temperatura efectiva en función del parámetro η y las distribuciones de probabilidad caracterizadas por persistencia grande $\chi = 0,05$ en función también de η creciente.	78
3.18. Comparación de las distribuciones de probabilidad obtenidas para partículas activas que exhiben patrones de movimiento RT (se supone estacionariedad y $J_{st} = 0$) y aquéllas para partículas pasivas moviéndose en un medio con temperatura inhomogénea.	79

3.19. Comparación de las distribuciones de probabilidad obtenidas para partículas activas que exhiben patrones de movimiento RT (se supone estacionariedad y $J_{st} = 0$) y aquellas para partículas pasivas moviéndose en un medio con temperatura inhomogénea. 79

Capítulo 1

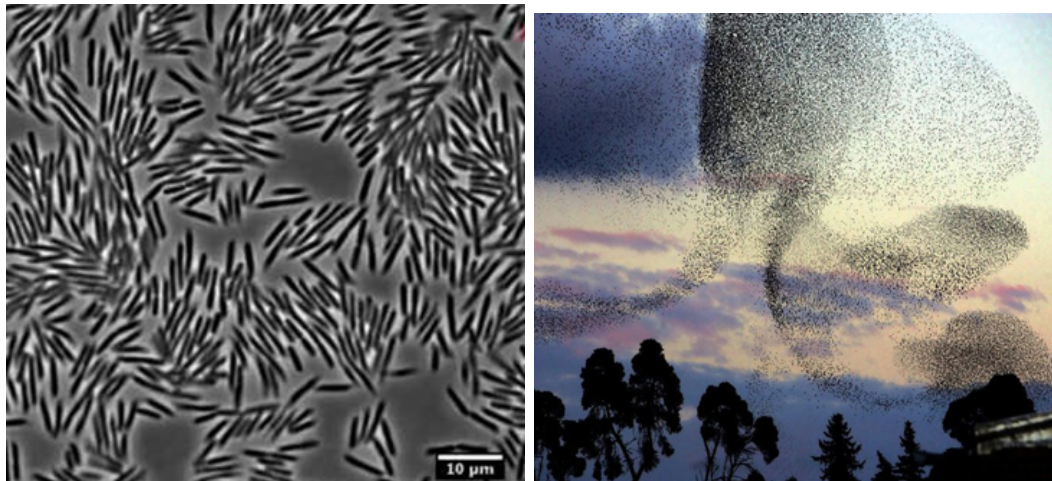
Introducción

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

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

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

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



(a) Colonia de bacterias *E. coli*

(b) Parvada de pájaros

Figura 1.1: Materia activa a nivel microscópico y macroscópico.

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

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

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

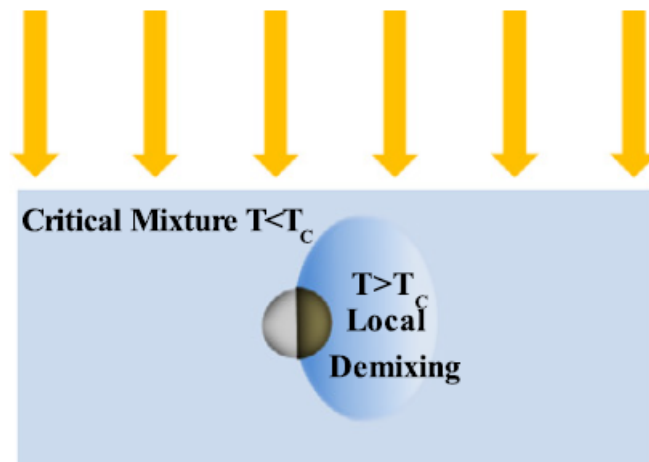


Figura 1.2: Explicación esquemática del mecanismo de autopropulsión en un micronadador: una partícula de Jano es iluminada calentando una de sus capas por encima de la temperatura crítica T_c induciendo con ello la separación de los recubrimientos siendo este el proceso que propulsa a la misma. [1]

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

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

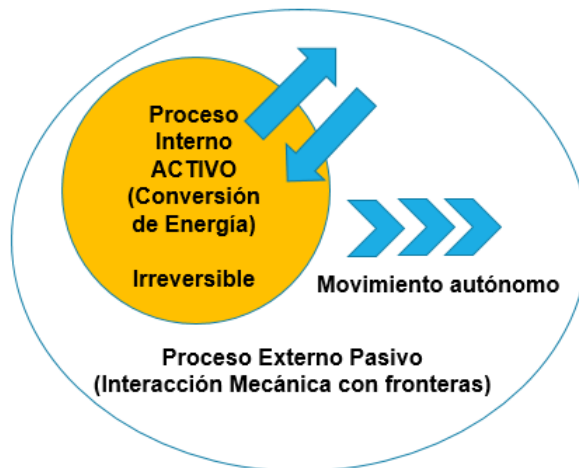


Figura 1.3: Proceso interno y externo en una partícula Browniana activa.

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

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

Con base en los párrafos anteriores podemos identificar dos enfoques o aproximaciones con relación a la descripción de sistemas activos. Por un lado la descripción en términos de los complejos mecanismos locales que mantienen intrínsecamente al sistema en una situación fuera de equilibrio y por otro lado la referente a las consecuencias de éstos en el movimiento que el sistema exhibe externamente.

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

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

En este sentido explicar dicha naturaleza en estos términos resulta más bien en una interpretación que se puede asociar a este comportamiento fuera de equilibrio más no significa que ésta sea la causa «real» del mismo, siendo ésta última los procesos internos en la partícula activa. Ejemplo de este tipo de interpretaciones es el bien conocido caso de la asociación de una temperatura efectiva a sistemas activos. En situaciones simples, la difusión de una sola partícula activa se puede interpretar como si se tratase de una partícula pasiva difundiéndose en un medio «más caliente» caracterizado por una temperatura efectiva homogénea que da cuenta de las fluctuaciones térmicas en el mismo, remitiéndonos a una situación de equilibrio tipo Boltzmann. Así, no es que ése sea exactamente el mecanismo que ocurre realmente, sino que se establece una equivalencia donde dicho fenómeno se puede interpretar ahora en términos de un sistema Browniano pasivo ordinario.

Determinar con precisión la impronta de la Física fuera de equilibrio a partir de las propiedades del movimiento activo ya sea que las partículas interactúen o no, frecuentemente resulta complicado [7]. En el ánimo de establecer un esquema que pudiera clarificar esta cuestión, se desarrolla este trabajo, explorando en el camino una conexión entre el movimiento Browniano activo descrito por partículas activas del tipo «run-and-tumble» y aquél efectuado por partículas Brownianas pasivas difundiéndose con movilidad constante en un medio inhomogéneo no isotérmico.

Capítulo 2

Marco teórico

2.1. Movimiento browniano pasivo

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

2.1.1. Antecedentes históricos

Podemos remontarnos hasta 1784, fecha en la que Jan Ingen-Hausz documentó el movimiento irregular que exhibían partículas pequeñas en determinado medio, en su caso partículas de carbón en polvo en un fluido. Posteriormente, en 1827, dicho movimiento irregular adquiriría importancia (y el nombre) de la mano de las observaciones del botánico inglés Robert Brown [8], quien estudiando al microscopio cómo se movían los granos de polen, esto en aras de comprender mejor el proceso de inseminación en plantas, observó con mayor detalle dicho fenómeno. En un principio atribuyó su origen a las partículas mismas, proponiendo incluso el nombre de "moléculas activas"; más adelante, en 1863, C. Wiener [9] después de observaciones experimentales propuso una noción más cercana a la explicación moderna: el movimiento 'perpetuo' e irregular se debe al movimiento no de la partícula en adelante referida como 'browniana', sino al de las partículas en el medio que la circunda; no es de extrañar estar propuesta si tomamos en cuenta que en

1859 Maxwell había formulado su famosa distribución de velocidades, siendo esta noción uno de los primeros atisbos de la naturaleza molecular y atómica de la materia que tendrá como consecuencia el desarrollo de la Teoría Cinética y en última instancia la Física Estadística. En efecto la explicación del movimiento Browniano en la segunda mitad del siglo XIX fue el campo de batalla donde se enfrentaron dos puntos de vista aparentemente opuestos, por un lado estaban los que creían que solo eran necesarias las consideraciones de la Termodinámica para su explicación y por otro quienes defendían la naturaleza intrínsecamente microscópica de la materia en su constitución y que atribuían la explicación de dicho fenómeno a las colisiones de las moléculas constituyentes del medio circundante sobre la partícula Browniana. En 1879 Nägeli se propuso refutar la explicación anterior. Estudiando las colisiones entre *una* molécula del fluido (con la misma velocidad) y la partícula Browniana concluyó que dichas colisiones eran insignificantes cuando de mover a la partícula Browniana se trataba descartando así que esa fuera la causa. En 1889, Gouy [10], después de un detallado análisis experimental llegó a ciertas conclusiones observacionales, tales como que si la viscosidad del fluido circundante disminuye, el movimiento browniano se ve amplificado, lo mismo sucede al aumentar la temperatura y si las partículas son más pequeñas.

Fue hasta 1905 el año en que Einstein [11] por primera vez obtuvo teóricamente una explicación satisfactoria combinando el proceso estocástico elemental conocido como caminata aleatoria con la distribución de velocidades de Maxwell-Boltzmann, siendo esta última clave en el desarrollo y uno de los errores en los que incurrió Nägeli al no considerar dicha naturaleza estadística; no todas las moléculas se movían con la misma velocidad además en un segundo las colisiones eran del orden de 10^{20} siendo su impacto verdaderamente significativo para la partícula Browniana. Ahora bien ¿Cuál fue la explicación de Einstein? Tal como había propuesto Wiener, el movimiento errático de las partículas se podía explicar en términos del ruido térmico generado por las moléculas (microscópicas) que conforman el medio circundante cuando impactan a la partícula Browniana (mesoscópica). Matemáticamente, la teoría de Einstein se sustentó en una ecuación diferencial parcial parabólica para la distribución de densidad de probabilidad del desplazamiento en una dimensión; este tipo de ecuaciones son conocidas actualmente con el nombre de ecuaciones de Fokker-Planck. En 1906 Smoluchowski [12] desarrolla una teoría cinética del movimiento Browniano obteniendo resultados análogos a los de Einstein, corroborando que el movimiento de la partícula Browniana se debe a la agitación molecular del medio en que se haya inmersa la partícula, todo esto a partir de un formalismo matemático similar al de Einstein, por tal motivo a este tipo de enfoque referido a la evolución temporal de una distribución de probabilidad, se le conoce como Teoría Einstein-Smoluchowski.

Los resultados obtenidos en dicha teoría fueron corroborados experimentalmente posteriormente por Perrin [13] recibiendo con ello el Premio Nobel de 1926.

La teoría desarrollada por Einstein y Smoluchowski aunque acertada, parecía no ser intuitiva en el sentido la mecánica Newtoniana, piedra angular de la explicación teórica dada al movimiento de los cuerpos. En este sentido fue que Langevin [14] plantea su teoría en 1908, más conectada a la formulación de Newton aunque con un ingrediente adicional: la estocasticidad en las fuerzas que inducen el movimiento. N. Wiener extiende estos conceptos desarrollando con ello la Teoría de Procesos Estocásticos, contribuyendo a su consolidación otros físicos y matemáticos entre los que se cuentan Uhlenbeck, Wang y Ornstein; todos ellos con el objetivo de refinar y formalizar la teoría del movimiento Browniano.

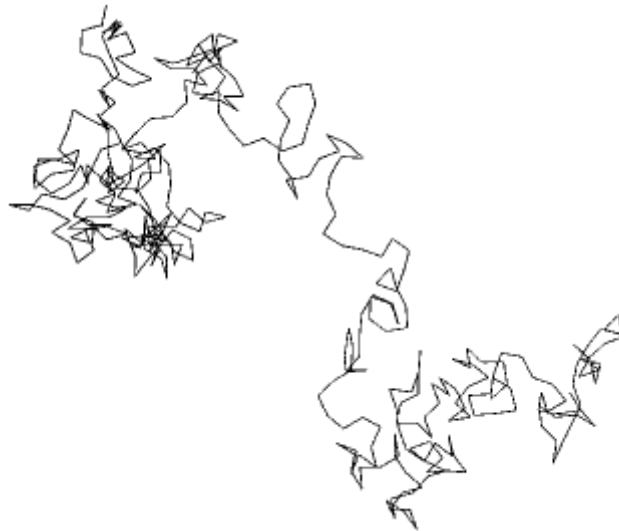


Figura 2.1: Trayectoria irregular observada en una partícula Browniana. [2]

2.1.2. ¿Qué es el movimiento Browniano?

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

la Figura 2.3, aumentando por supuesto dicha irregularidad si los tiempos de observación se hacen más pequeños. Como demostró N. Wiener [15] en 1923, dichos puntos de muestra presentan continuidad en prácticamente todo sitio a diferencia de la diferenciabilidad que no muestra ningún punto. Cabe mencionar que además dicha trayectoria representa una de los ejemplos más citados de lo que ahora se conoce como un *fractal aleatorio* [16], estructuras que presentan autosimilaridad ante cambios en la escala de observación.

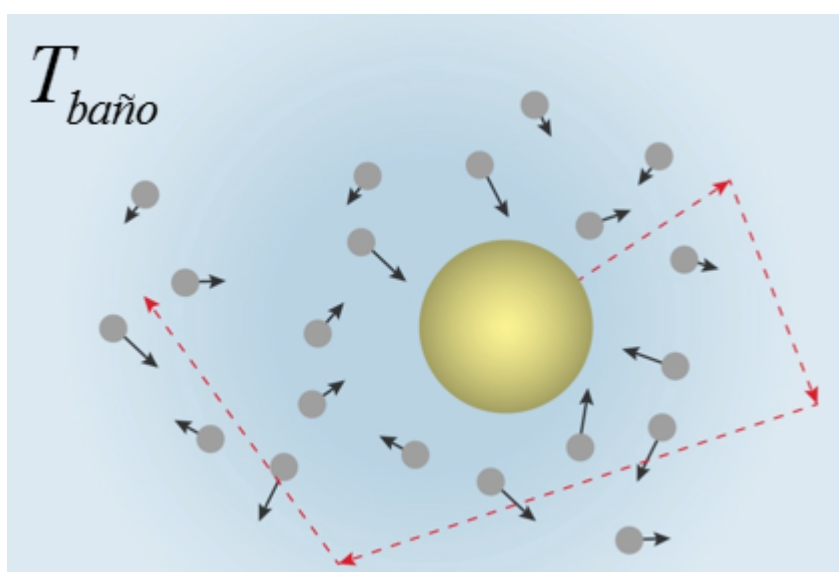


Figura 2.2: Partícula Browniana (mesoscópica) bombardeada por las moléculas (microscópicas) que conforman el medio circundante o baño térmico a una temperatura homogénea.

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

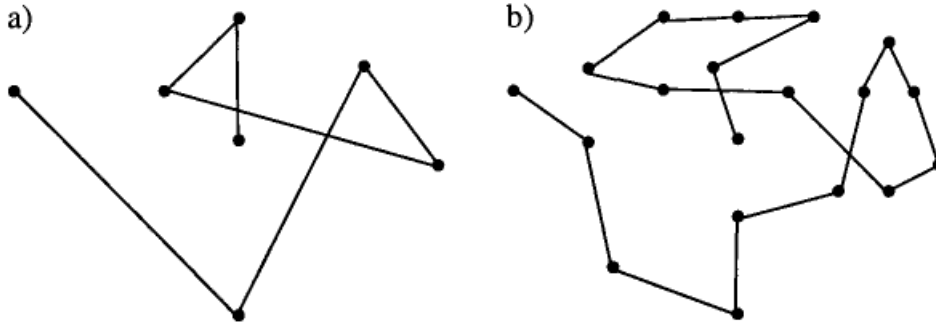


Figura 2.3: Trayectoria de una partícula Browniana: (a) Observación a intervalos de 30 s. y (b) a intervalos de 10 s. [2]

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

2.1.3. Ecuación de Langevin

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

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

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

- (i) Una fuerza disipativa (fricción) que ejerce el fluido circundante, siendo proporcional a la velocidad de la partícula a través del coeficiente γ ó su inverso $\mu = \frac{1}{\gamma}$, este último referido en adelante como la movilidad de la partícula Browniana, es decir, la velocidad de corriente ('drift') que adquiere la partícula por unidad de fuerza externa.
- (ii) Una fuerza estocástica $\mathcal{F}(t)$ que fluctúa 'rápidamente'; siendo su fuente las colisiones de las moléculas que conforman el fluido circundante contra la partícula Browniana.
- (iii) Una fuerza externa derivable de un potencial (conservativa) $U(\mathbf{r})$. Por ejemplo el campo gravitatorio actuando en la partícula.

Lo anterior se puede expresar matemáticamente como

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

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

ó en términos del momento lineal

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\langle \xi(t) \rangle = 0 \quad (2.10)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Así 2.15 se puede generalizar a

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

donde d denota la dimensión del movimiento Browniano.

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

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

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

con amplitud del ruido

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

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

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

sujeta a las propiedades estadísticas

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

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

donde ahora se utiliza D para denotar la amplitud de este ruido gaussiano generalizado. El término $A_i(\mathbf{r}, t)$ físicamente corresponde al proceso de transporte de la partícula en el fluido circundante, por ello se denomina término de *corriente* (drift), mientras que $B_{ik}(\mathbf{r}, t) \Gamma_k(t)$ corresponde a los procesos difusivos, denominándose por tanto término de difusión.

2.1.4. Ecuación de Fokker-Planck

Si bien la descripción de en términos de la ecuación de Langevin proporcionó un enfoque intuitivo desde el punto de vista físico, no es la única manera de abordar el problema del movimiento de una partícula Browniana. En el enfoque Langevin conocido formalmente como Teoría de Ornstein-Uhlenbeck,

se utilizó la descripción de la variación temporal de procesos estocásticos para averiguar sus momentos estadísticos, en particular el referente al desplazamiento de la partícula. Matemáticamente, podemos abordar de manera equivalente el problema tratando directamente con las densidades de probabilidad, es decir, ahora se busca responder la pregunta (por simplicidad en una dimensión): ¿cuál es la probabilidad de encontrar un valor $x(t)$ (de la trayectoria) correspondiente al ensamble de procesos $\mathbf{x}(t)$ (todas las posibles trayectorias que sigue la partícula) a cierto tiempo t entre x y $x + dx$? Esta descripción fue la empleada por Einstein y la primera en explicar el movimiento Browniano teóricamente, actualmente se le denomina a este enfoque probabilístico Teoría de Einstein-Smoluchoski.

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

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

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

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

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

El hecho de que la solución a la ecuación de Langevin sea un proceso de Markov implica que ésta obedece una ecuación Maestra la cual se puede expresar en la denominada forma Kramers-Moyal, resultado bien conocido de la teoría de procesos estocásticos. En una dimensión la expansión está dada por

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

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

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

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

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

Expandiendo en serie de Taylor alrededor del valor inicial x_0

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

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

y sustituyendo en 2.28

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

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

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

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

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

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

y utilizando la propiedad $\int_{t_0}^{t_1} dt \delta(t - t_0) f(t) = \frac{1}{2} f(t_0)$ en el integrando con dicha función

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

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

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

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

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

Los coeficientes para $m \geq 3$ se consideran nulos.

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

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

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

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

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

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

la cual se puede generalizar al caso multivariable en tres dimensiones

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

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

Ecuación de Klein-Kramers

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

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

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

con las propiedades del ruido

$$\langle \xi(t) \rangle = 0 \quad (2.44)$$

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

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

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

y

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

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

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

expresándose en tres dimensiones como

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

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

Ecuación de Smoluchowski

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

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

con

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

de donde se pueden obtener los términos

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

y finalmente sustituyendo en 2.40

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

generalizándose a tres dimensiones

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

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

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

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

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

2.1.5. Teorema de fluctuación-disipación

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

A continuación se exponen brevemente algunos resultados conocidos de la teoría de análisis espectral [17]. Un proceso estocástico $\mathbf{z}(t)$ se puede expandir través del desarrollo de Fourier

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

con las frecuencias

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

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

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

además ya que el proceso estocástico se considera real, el coeficiente de Fourier es de la forma

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

Se puede obtener la fuerza del coeficiente de Fourier \mathbf{a}_n

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

siendo la suma de los promedios cuadráticos medios de la parte real e imaginaria. Ahora, si se seleccionan solamente las frecuencias en cierto intervalo $\Delta\omega$, las fuerzas de los componentes de Fourier son observables utilizando un filtro adecuado. Así la intensidad o potencia promedio es

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

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

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

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

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

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

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

En todas las ecuaciones de Langevin tratadas hasta ahora se ha supuesto que el ruido cumple con las propiedades estadísticas del llamado ruido blanco Gaussiano, por ejemplo las ecuaciones 2.8 y 2.9. En estos casos se supone por ejemplo que la partícula Browniana es mucho más pesada que las partículas en el medio, sin embargo, el movimiento Browniano puede abarcar otro tipo de aspectos más generales donde visto en un sentido amplio se refiere al movimiento fluctuante de un modo en cierto sistema dinámico macroscópico que puede contener un gran número de grados de libertad o partículas. Si se consideran estos casos la suposición de ruido blanco Gaussiano ya no es válida para el proceso de la fuerza aleatoria $\mathbf{\Gamma}(t)$ [18] lo cual queda de manifiesto utilizando ahora una fricción retardada a diferencia del valor constante γ asociado anteriormente con la velocidad instantánea de la partícula.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

con

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

donde los límites de integración de 0 a ∞ denotan una transformada de Fourier-Laplace en adelante referida mediante los corchetes. La tilde superior en los coeficientes de Fourier representa el hecho de que son las transformadas de Fourier de sus respectivos procesos. Ahora de 2.70 se puede obtener el espectro de intensidad correspondiente a cada proceso, esto tomando en cuenta que los procesos de la fuerza y la velocidad son estacionarios en un tiempo lo suficientemente grande, de este modo se puede utilizar la definición 2.64, obteniendo

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

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

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

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

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

es decir

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

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

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

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

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

e inversamente

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

donde $\phi_{\mathbf{F}}$ se refiere a la función de autocorrelación del proceso de la fuerza

$$\phi_{\mathbf{F}}(t) = \langle \mathbf{F}(t) \mathbf{F}(t') \rangle \quad (2.80)$$

Sustituyendo 2.77 en 2.79 se tiene

$$\langle \mathbf{F}(\omega) \mathbf{F}^*(\omega) \rangle = \frac{mk_B T}{\pi} \text{Re} \{ \tilde{\gamma}[\omega] \delta(\omega - \omega') \} \quad (2.81)$$

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

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

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

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

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

$$\langle \mathbf{F}(t) \mathbf{F}(t') \rangle = mk_B T \gamma(t - t') \quad (2.84)$$

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

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

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

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

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

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

podemos tomar la transformación inversa de 2.86 obteniendo

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

y en analogía la ecuación 2.84 se puede escribir como

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

la dos expresiones anteriores son conocidas como Teorema de Fluctuación-Disipación del primer y segundo tipo, respectivamente. En ambos casos se relaciona la respuesta (admitancia/movilidad $\tilde{\mu}(\omega)$ ó impedancia/fricción $\gamma[\omega]$) de cierto sistema a una perturbación externa con las fluctuaciones térmicas generadas de manera espontánea en dicho sistema expresadas en forma de la autocorrelación de los procesos de velocidad y fuerza.

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

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

Ya que

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

entonces 2.90 se puede escribir como

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

suponiendo que

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

Por último, sustituyendo en la ecuación anterior el Teorema de Fluctuación del primer tipo se obtiene directamente

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

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

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

Cabe señalar que el Teorema FD del primer tipo se puede derivar de manera general a partir de la Teoría de Respuesta Lineal obteniéndose una expresión equivalente aunque un tanto más elegante

$$\tilde{\phi}_\chi(\omega) = \frac{2k_B T}{\omega} \text{Im} \tilde{\chi}(\omega) \quad (2.96)$$

donde se refiere en general a la respuesta de cualquier susceptibilidad χ .

2.1.6. Equilibrio local

En este trabajo se trata de establecer cierta equivalencia entre el movimiento browniano pasivo que se lleva a cabo en un medio inhomogéneo y aquél que pudiera observarse en un tipo particular de dinámica activa, a saber «run-and-tumble». Por supuesto es importante establecer qué se quiere decir con dicha inhomogeneidad y aún más cómo se expresa y fundamenta su tratamiento. Aquí se interpreta inhomogeneidad como la variación espacial de las propiedades del medio e.g., $T(x)$ o las propiedades dinámicas en el mismo (e.g., $\mu(x), \gamma(x)$). Pues bien, en efecto la Termodinámica de equilibrio lidia con estos casos utilizando el concepto de equilibrio local, el cual establece que las relaciones termodinámicas son válidas para todas las variables termodinámicas asignadas a un elemento de volumen [19]. Dado el caso de un sistema en el que suponemos equilibrio local, lo que se tiene es una teoría en la que las variables termodinámicas intensivas se reemplazan por funciones de la posición \mathbf{r} y el tiempo t , es decir

$$T = T(\mathbf{r}, t), \quad P = P(\mathbf{r}, t) \quad (2.97)$$

y las variables extensivas por densidades

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

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

$$n_k(\mathbf{r}, t) \quad (2.100)$$

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

$$P(\mathbf{v}) d^3\mathbf{v} = \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{m}{2k_B T} v^2} d^3\mathbf{v} \quad (2.101)$$

Esta temperatura homogénea caracteriza el baño térmico en que se encuentran embebidas las partículas o moléculas que tienen dicha distribución de velocidades. Por ejemplo, en el caso ordinario de movimiento Browniano el medio en el que se encuentra embebida la partícula se encuentra en equilibrio termodinámico ya que podemos asignarle una temperatura efectiva homogénea al baño que la rodea. Prigogine [20], ofrece un análisis de ciertos sistemas fuera de equilibrio que pueden cumplir dicha suposición de localidad refiriendo a que todos ellos siempre pueden ser descritos mediante la fórmula de Gibbs o descripción entrópica del sistema

$$ds = \frac{1}{T} de - \frac{P}{T} dv + \sum_r \frac{\mu}{T} dX_r \quad (2.102)$$

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

En esta dirección van Kampen [21] propone un modelo difusivo para una partícula browniana en un medio inhomogéneo no isotérmico, la cual puede ser descrita por una ecuación de Smoluchowski que a diferencia de 2.53, en ésta tanto la difusión (o temperatura) así como la movilidad en la misma

varían con la posición. Dicha ecuación se puede deducir formalmente a partir la ecuación de Klein-Kramers que análogamente toma en cuenta dicha inhomogeneidad del medio a través de una temperatura y coeficiente de fricción dependientes de la posición. Agregando dichas dependencias espaciales tenemos que 2.48 se puede expresar como

$$\frac{\partial P(x, v, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial P}{\partial x} + U'(x) \frac{\partial P}{\partial v} + \gamma(x) \frac{\partial v P}{\partial v} + D_v(x) \frac{\partial^2 P}{\partial v^2} \quad (2.103)$$

y de la expresión para el teorema de fluctuación-disipación 2.95 con dependencia espacial

$$D_v(x) = k_B T(x) \gamma(x) \quad (2.104)$$

se tiene

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

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

$$\frac{\partial}{\partial v} \left[v P + T(x) \frac{\partial P}{\partial v} \right] = \frac{1}{\gamma} \left[\frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x} - U'(x) \frac{\partial}{\partial v} \right] P \quad (2.106)$$

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

$$P(x, v, t) = P^{(0)} + \gamma^{-1} P^{(1)} + \gamma^{-2} P^{(2)} + \dots \quad (2.107)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial v} \left[v P^{(0)} + T(x) \frac{\partial P^{(0)}}{\partial v} \right] = 0 \quad (2.108)$$

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

$$P^{(0)}(x, v, t) = e^{-\frac{v^2}{2T}} f(x, t) \quad (2.109)$$

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

$$\frac{\partial P^{(0)}}{\partial t} + v \frac{\partial P^{(0)}}{\partial x} - U'(x) \frac{\partial P^{(0)}}{\partial v} = \gamma(x) \frac{\partial}{\partial v} \left[v P^{(1)} + k_B T(x) \frac{\partial P^{(1)}}{\partial v} \right] \quad (2.110)$$

donde uno puede sustituir 2.109, obteniendo

$$\gamma(x) \left\{ \frac{\partial}{\partial v} v + T(x) \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right\} P^{(1)} = \left[\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} + U'(x) f \frac{v}{T(x)} \right] e^{-\frac{v^2}{2T}} \quad (2.111)$$

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

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = 0 \quad (2.112)$$

Por tanto, la integrabilidad de 2.111 implica que f es independiente del tiempo así como $P^{(0)}$. Asimismo, 2.111 se puede reescribir como

$$e^{-\frac{v^2}{2T}} \left[v f' + \frac{v^2}{2T^2} T' f + \frac{v}{T} U' f \right] = \gamma T \frac{\partial}{\partial v} e^{-\frac{v^2}{2T}} \frac{\partial}{\partial v} e^{-\frac{v^2}{2T}} P^{(1)} \quad (2.113)$$

cuya ansatz propuesto de solución es

$$P^{(1)}(x, v, t) = [v\phi(x, t) + v^3\psi(x, t)] e^{-\frac{v^2}{2T}} \quad (2.114)$$

con ψ y ϕ dados por

$$\psi(x) = -\frac{T'}{6\gamma T^2} f \quad (2.115)$$

$$\phi(x) = -\frac{(Tf)' + U'f}{\gamma T} \quad (2.116)$$

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

$$P^{(1)}(x, v, t) = [v\phi(x) + v^3\psi(x) + g(x, t)] e^{-\frac{v^2}{2T}} \quad (2.117)$$

Para los términos de orden γ^{-2} se puede obtener una ecuación análoga a 2.111 para $P^{(2)}$ sustituyendo ahora la solución 2.114. De nuevo el integrar con respecto a v produce la condición de integrabilidad

$$\int dv \left[\frac{\partial P^{(1)}}{\partial t} + v \frac{\partial P^{(1)}}{\partial x} - U'(x) \frac{\partial P^{(1)}}{\partial v} \right] = 0 \quad (2.118)$$

Esta ecuación se puede escribir como

$$\frac{\partial}{\partial t} \int dv P^{(1)} = -\frac{\partial}{\partial x} \int dv v P^{(1)}(x, v) \quad (2.119)$$

sustituyendo 2.114

$$= -\frac{\partial}{\partial x} \int dv [v^2\phi(x) + v^4\psi(x)] e^{-\frac{v^2}{2T}} \quad (2.120)$$

se puede resolver la integral

$$= -\frac{\partial}{\partial x} \sqrt{2\pi T} [T\phi(x) + 3T^2\psi(x)] \quad (2.121)$$

y sustituyendo las expresiones para ψ y ϕ

$$= -\sqrt{2\pi} \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{\gamma} \left[\frac{\partial}{\partial x} T^{\frac{3}{2}} f + U' T^{\frac{1}{2}} f \right] \quad (2.122)$$

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

$$\begin{aligned} P(x, t) &= \int dv P^{(0)}(x, v) + \int dv P^{(1)}(x, v, t) + \dots \\ &= \sqrt{2\pi T} f(x) + O\left(\frac{1}{\gamma}\right) \end{aligned} \quad (2.123)$$

Con esto la ecuación 2.118 obtenida para $P^{(1)}$ (condición de integrabilidad) se puede traducir como

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{\gamma(x)} \left[\frac{\partial}{\partial x} T(x) P(x, t) + U'(x) P(x, t) \right] \quad (2.124)$$

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

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

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

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

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

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} [\mu(x) U'(x) - \mu'(x) T(x)] P(x, t) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} D_x(x) P(x, t) \quad (2.127)$$

Donde se utilizó el hecho de que la relación de fluctuación-disipación se cumple localmente, esto es

$$D_x(x) = \frac{k_B T(x)}{\gamma(x)} = \mu(x) k_B T(x) \quad (2.128)$$

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

En las ecs. 2.126 y 2.127 los primeros términos en el miembro derecho son lo que podría tomarse al menos de acuerdo a la estructura de la ecuación como el término de drift en una ecuación de Fokker-Planck y de manera particular en este tipo de ecuación de Smoluchowski. Aunque por supuesto este no tiene la forma ortodoxa de la movilidad multiplicada por la fuerza, en lugar de ello aparece un término adicional que se podría relacionar a un potencial térmico en 2.126 y otro más controversial en 2.127. En el caso del segundo término (difusivo) se tienen también dos opciones, siendo ambas discutidas por el texto clásico de van Kampen [22], en el que se concluye que ambas pueden ser correctas dependiendo del sistema físico en particular.

Por otro lado, como se verá en el siguiente capítulo, en este trabajo se considera para el caso de movimiento activo que la movilidad de la partícula no depende del espacio, siendo constante. En este sentido se han escrito varios artículos, los cuales consideran un medio no isotérmico donde la movilidad es constante [23]. Desde el enfoque Fokker-Planck se ha derivado rigurosamente una ecuación de Smoluchowski (régimen sobreamortiguado) para partículas Brownianas en un medio no isotérmico [24]. Asimismo desde el enfoque tipo Langevin también se ha derivado este régimen tomando en cuenta dicha consideración [25]. Cabe mencionar que dichos estudios se hicieron con el motivo de dirimir la cuestión que se presenta precisamente en el caso en que la amplitud del ruido presenta dependencia espacial. En este contexto surge el dilema de Itô-Stratonovich, el cual plantea que dependiendo de la prescripción para evaluar el valor que debe tomar x en dicha amplitud del ruido dependiendo espacialmente, se obtienen dos ecuaciones de Smoluchowski ligeramente distintas al tomar alguna de las dos prescripciones clásicas para resolver ecuaciones diferenciales estocásticas: Itô ó Stratonovich.

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

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \mu \frac{\partial}{\partial x} \left[U'(x) P(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} T(x) P(x, t) \right] \quad (2.129)$$

la cual es completamente análoga a aquella derivada por van Kampen (ec. 2.125). En este caso es trivial expresarla como la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = - \frac{\partial J(x, t)}{\partial x} \quad (2.130)$$

expresada explícitamente como

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[-\mu U'(x) P(x, t) - \mu \frac{\partial}{\partial x} T(x) P(x, t) \right] \quad (2.131)$$

con lo cual queda definida la corriente

$$J(x, t) = -\mu U'(x) P(x, t) - \mu \frac{\partial}{\partial x} T(x) P(x, t) \quad (2.132)$$

Ahora bien, como se mencionó anteriormente estamos interesados en expresiones para movilidad constante, lo cual condiciona el cumplimiento riguroso de la relación de fluctuación-disipación local (ec. 2.128). En el caso de movilidad constante se tendría la expresión análoga

$$D_x(x) = \frac{k_B T(x)}{\gamma} = \mu k_B T(x) \quad (2.133)$$

Esta expresión como tal es discutible en el sentido de que no se puede afirmar que se cumple fluctuación-disipación localmente dado que la movilidad es constante y por ende desacoplada del término referente a la temperatura del local del medio. Sin embargo dejando de lado este acoplamiento contenido en la relación fluctuación-disipación entre la respuesta de la partícula a las perturbaciones hechas por el medio físico, al cual por supuesto podemos asociar una temperatura $T(x)$, se supone la siguiente identificación

$$\mathcal{D}(x) = \frac{k_B \mathcal{T}(x)}{\gamma} = \mu k_B \mathcal{T}(x) \quad (2.134)$$

En esta expresión análoga a la relación de fluctuación-disipación, la temperatura efectiva $\mathcal{T}(x)$ por supuesto no se refiere a la noción intuitiva de la temperatura $T(x)$ que tiene el medio circundante, más bien se refiere a una cantidad que da cuenta, a través de cantidades dinámicas, del movimiento intrínsecamente estocástico que tienen las partículas. Esto se discute con más detenimiento en el capítulo 3.

Con esta identificación 2.132 se puede escribir como

$$J(x, t) = -\mu U'(x) P(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{D}(x) P(x, t) \quad (2.135)$$

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

$$J(x, t) = \mathcal{V}_{\text{drift}}(x) P(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{D}(x) P(x, t) \quad (2.136)$$

La solución estacionaria a la ecuación de Fokker-Planck (Smoluchowski) encontrada por Matsuo (ec. 2.131) está dada por

$$P_{\text{st}}(x) = \frac{\mathcal{N}(0)}{\mathcal{D}(x)} \exp \left\{ \int^x dx' \frac{\mathcal{V}_{\text{drift}}(x')}{\mathcal{D}(x')} \right\} \quad (2.137)$$

donde se ha puesto el término correspondiente a la difusión efectiva asociada a la estocasticidad del movimiento en las partículas. Es importante enfatizar que en esta sección se expusieron desarrollos teóricos utilizados para describir partículas Brownianas *pasivas* con la particularidad de que a estas expresiones se ha asociado, en lugar de la difusión/temperatura ordinarias acopladas formalmente a través de la relación fluctuación-disipación, una difusión/temperatura efectiva relacionadas no a este acoplamiento intuitivo medio-partícula sino a las propiedades estocásticas intrínsecas en la dinámica de la partícula que por supuesto deben tener relación al acoplamiento riguroso de equilibrio local en la relación FD. Como se verá en el siguiente capítulo, un tipo de dinámica estocástica propia de partículas que exhiben movimiento activo, a saber, «run-and-tumble», se conecta con el caso pasivo precisamente a través de estos términos de difusión/temperatura efectivos.

2.2. Movimiento browniano activo

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

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

Estas características por supuesto son consecuencia de esta energía adicional, entonces, ¿cómo agregar esta energía a los modelos dinámicos introducidos para el caso pasivo? Ese ha sido el punto de partida en la mayoría de modelos propuestos cuando de modelar la dinámica individual de partículas brownianas activas se trata. En esta sección se abordan brevemente algunos de estos

modelos, todos ellos partiendo de una ecuación diferencial estocástica con alguna adecuación que busca hacer las veces de esta energía extra.

2.2.1. Fricción dependiente de la velocidad

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

Ahora veamos como la no linealidad en el término disipativo sirve como mecanismo para la inclusión de la energía adicional del entorno. Se toman las ecuaciones de Langevin 2.8 y 2.9, variando solo en el hecho de la dependencia de la velocidad por parte de γ , entonces se tiene

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla U(\mathbf{r}) - \gamma(\mathbf{v})\mathbf{v} + \sqrt{2D}\boldsymbol{\xi}(t) \quad (2.138)$$

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v} \quad (2.139)$$

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

$$E = \frac{1}{2}\mathbf{v}^2 + U(\mathbf{r}) \quad (2.140)$$

cuya derivada con respecto al tiempo es

$$\frac{dE}{dt} = \mathbf{v} \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \nabla U(\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{r}}{dt} \quad (2.141)$$

donde al sustituir 2.138 y promediar sobre el ruido, se obtiene

$$\frac{d}{dt} \langle E \rangle = -\gamma(\mathbf{v})\mathbf{v}^2 + D \quad (2.142)$$

de lo cual podemos inferir que valores negativos para el coeficiente de fricción resultan en un incremento de la energía mecánica; es por ello que también

se conoce como modelo de *fricción negativa* y es precisamente ésta la representación del influjo de energía adicional a la partícula Browniana que se buscaba. Debido a este mecanismo las partículas moviéndose lentamente son aceleradas mientras que las más rápidas se ven amortiguadas. Este mecanismo de bombeo constante es precisamente lo que autopropulsa a la partícula activa.

Por supuesto también es posible asociar a 2.138 la ecuación de Fokker-Planck

$$\frac{\partial P(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t | \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t_0)}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial P}{\partial \mathbf{r}} + \nabla U(\mathbf{r}) \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left[\gamma(\mathbf{v}) \mathbf{v} P + D \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}} \right] \quad (2.143)$$

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

$$P_{st}(\mathbf{v}) = N \exp \left\{ -\frac{1}{D} \int^v d\mathbf{v}' \gamma(\mathbf{v}') \mathbf{v}' \right\} = N \exp \left\{ -\frac{\Phi(\mathbf{v})}{D} \right\} \quad (2.144)$$

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

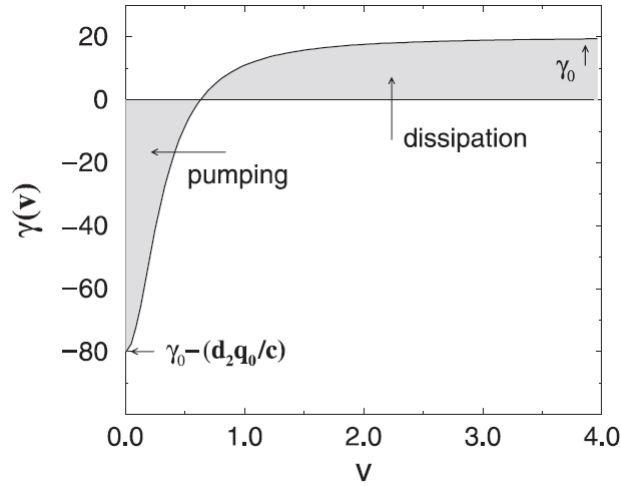


Figura 2.4: Fricción en función de la velocidad. Se observan los estadios de bombeo para el caso $|\gamma(\mathbf{v})| < 0$ y disipación para $|\gamma(\mathbf{v})| > 0$. [3]

Modelo Rayleigh-Helmholtz

Propuesto en un principio para tratar aspectos relacionados con acústica, es considerado el punto de partida en lo que se refiere a los modelos de

fricción no lineal [26]; en general se supone un comportamiento parabólico del coeficiente de fricción dado por

$$\gamma(\mathbf{v}) = -\gamma_1 + \gamma_2 \mathbf{v}^2 \quad (2.145)$$

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

$$\gamma(\mathbf{v}) = \gamma_1 \left(\frac{v^2}{v_0^2} - 1 \right) = \gamma_2 (v^2 - v_0^2) \quad (2.146)$$

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

$$P_{st}(\mathbf{v}) = N \exp \left\{ \frac{1}{D} \left(\alpha \frac{\mathbf{v}^2}{2} - \beta \frac{\mathbf{v}^4}{4} \right) \right\} \quad (2.147)$$

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

Modelo Schienbein-Gruler

Considerado la versión lineal del mecanismo de Helmholtz-Rayleigh e inspirado en experimentos con movimiento celular [27], toma como variable del sistema la rapidez $|\mathbf{v}|$, expresando el coeficiente de fricción como

$$-\gamma(\mathbf{v}) \mathbf{v} = -\gamma_0 (|\mathbf{v}| - v_0) \mathbf{e}_v \quad (2.148)$$

con lo cual la distribución estacionaria de velocidades es

$$P_{st}(\mathbf{v}) = N \exp \left\{ -\frac{\gamma_0}{2D} (|\mathbf{v}| - v_0)^2 \right\} \quad (2.149)$$

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

2.2.2. Modelo de depósito

Ahora se expone un modelo más intuitivo tomando en cuenta que consiste en un mecanismo que nos remite al comportamiento metabólico en seres vivos

al considerar que la partícula browniana activa capaz de tomar energía del entorno ahora también lo es de almacenar algo de ésta en un *depósito interno*, $e(t)$ [28], que sufre modificaciones a través de

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

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

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

$$\frac{d}{dt}e(t) = q(\mathbf{r}) - ce(t) - h(\mathbf{v})e(t) \quad (2.150)$$

con el ansatz

$$q(\mathbf{r}) = q_0 \quad h(\mathbf{v}) = d\mathbf{v}^2 \quad (2.151)$$

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

$$\mathbf{F}_{diss}(\mathbf{v}) = -\gamma_0\mathbf{v} + de(t)\mathbf{v} \quad (2.152)$$

con lo que la ecuación de Langevin para este modelo es

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\gamma_0\mathbf{v} + de(t)\mathbf{v} - \nabla U(\mathbf{r}) + \mathcal{F}(t) \quad (2.153)$$

estando acoplada con la ecuación para el depósito de energía 2.150.

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

$$\frac{dE}{dt} = [de(t) - \gamma_0]\mathbf{v}^2 + \sqrt{2D}\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi} \quad (2.154)$$

donde el término $de(t)\mathbf{v}^2$ es exactamente el negativo del último término en el balance de energía 2.150.

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

$$\mathbf{F}_{diss}(\mathbf{v}) = - \left[\gamma_0 - \frac{dq}{c + d\mathbf{v}^2} \right] \mathbf{v} \quad (2.155)$$

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

$$\gamma(\mathbf{v}) = \gamma_0 - \frac{dq}{c + d\mathbf{v}^2} \quad (2.156)$$

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

$$\gamma(\mathbf{v}) = \left(\gamma_0 - \frac{dq}{c} \right) - \frac{qd}{c^2} \mathbf{v}^2 + \mathcal{O}(\mathbf{v}^4) \quad (2.157)$$

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

$$\gamma_1 = \frac{dq}{\gamma_0} - \gamma_0; \quad \gamma_2 = \frac{qd}{c^2} \quad (2.158)$$

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

Para concluir este apartado podemos de manera análoga a los modelos anteriores obtener una distribución estacionaria para las velocidades tomando la ecuación de Langevin (ec. 2.153) con la fuerza disipativa efectiva (ec. 2.155), obteniendo con ello la ecuación de Fokker-Planck correspondiente cuya solución estacionaria es

$$P_{st}(\mathbf{v}) = \mathcal{N} \left(1 + \frac{d}{c} \mathbf{v}^2 \right)^{\frac{q_0}{2D}} \exp \left[-\frac{\gamma_0}{2D} \mathbf{v}^2 \right] \quad (2.159)$$

2.3. Dinámica «run-and-tumble»

Los modelos descritos anteriormente abordan el movimiento activo partiendo en términos generales de una ecuación diferencial estocástica (enfoque Ornstein-Uhlenbeck) en la cual se toma ya sea un coeficiente de fricción dependiente de la velocidad o se añade el término de depósito capturando ambos

mecanismos la noción de una energía adicional en la forma de una especie de fricción negativa o un depósito que la almacena y transforma en movimiento. Posteriormente se puede trasladar esta ecuación de Langevin a su correspondiente ecuación de Fokker-Planck (enfoque Einstein-Smoluchowski) obteniéndose resultados ahora en términos de la distribución de velocidades. En ambos casos es la velocidad de la partícula la que dicta el tipo de dinámica que ésta sigue, no existiendo así una dependencia explícita del espacio siendo precisamente uno de los aspectos que el modelo run-and-tumble considera. En principio este modelo no captura los procesos termodinámicos que involucra la transferencia de energía entre la partícula y el entorno, más bien da cuenta de la dinámica particular que exhiben ciertos organismos, siendo por tanto un enfoque orientado a los patrones en las trayectorias que siguen las partículas brownianas activas.

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

- (i) Longitud de persistencia mayor al caso pasivo.
- (ii) Cambios discontinuos en la dirección durante el proceso difusivo.
- (iii) Comportamiento variable en función de la presencia de un potencial cercano.

A diferencia del caso pasivo en el que la longitud de persistencia, es decir, la distancia que la partícula mantiene cierta dirección, es pequeña debida a los constantes cambios de dirección imprimidos por las colisiones de las moléculas del medio, en el caso activo dicha longitud de persistencia reviste mayor importancia ya que por ejemplo un organismo macroscópico v.g. un mono puede mantener cierta dirección durante un tiempo considerable cambiándola eventualmente debido a la presencia de un depredador; en el caso de la partícula browniana pasiva prácticamente es en todo momento el cambio de dirección ya que las colisiones no cesan. En este sentido podemos remontarnos a los trabajos pioneros de Fürth [29] y Taylor [30] donde sugieren tratar este tipo de sistemas difusivos a través de una caminata aleatoria persistente. Posteriormente Goldstein [31] desarrolla una teoría difusiva basada en movimientos discontinuos, es decir, toma en cuenta estos cambios en la dirección de la partícula planteando con ello la conexión de este tipo de fenómenos con el bien conocido proceso del telégrafo [32] a tratar a continuación.

En una dimensión se tiene

$$\frac{\partial P_R(x, t)}{\partial t} = -c(x, t) \frac{\partial P_R(x, t)}{\partial x} + \frac{1}{2T} [P_L(x, t) - P_R(x, t)] \quad (2.160)$$

$$\frac{\partial P_L(x, t)}{\partial t} = c(x, t) \frac{\partial P_L(x, t)}{\partial x} + \frac{1}{2T} [P_R(x, t) - P_L(x, t)] \quad (2.161)$$

El sistema anterior de ecuaciones se puede escribir en la forma de una ecuación diferencial parcial de segundo orden tomando en cuenta que ahora se utilizará como variable dependiente la suma de las distribuciones de probabilidad derecha e izquierda

$$P(x, t) = P_R(x, t) + P_L(x, t) \quad (2.162)$$

Por tanto

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{c(x, t)} \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} \right] + \frac{1}{Tc(x, t)} \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[c(x, t) \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} \right] \quad (2.163)$$

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

$$\frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial t^2} + \frac{1}{T} \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = c^2 \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} \quad (2.164)$$

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

$$\frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial t^2} = D^2 \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} \quad (2.165)$$

Matemáticamente el modelo de run-and-tumble se encuentra conectado a las ecuaciones 2.160 y 2.161 las cuales describen un proceso telegráfico generalizado. Ahora bien, ¿qué tipo de partícula activa exhibe una dinámica con estas características de persistencia y difusión discontinua? Desde el punto de vista fenomenológico el modelo run-and-tumble tiene su inspiración en el movimiento observado en bacterias, siendo el ejemplo paradigmático la bacteria *Escherichia coli* (*E. coli*), organismo unicelular con filamentos flagelares externos.

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

- **Herencia.**- Las bacterias llevan miles de millones de años en la Tierra, por lo que varias de sus estrategias de adaptación y supervivencia se transmitieron a nosotros, ejemplo de ello son los mecanismos a nivel celular para tomar energía del entorno.
- **Tamaño y forma.**- Su tamaño del orden de $2.5 \mu m$ de largo y un diámetro de $0.8 \mu m$ las convierte por supuesto en entes muy pequeños a nivel biológico con lo cual el estudio de sus características dinámicas y termodinámicas nos brinda conocimiento acerca de lo que podrían ser dispositivos artificiales que emularan dichas características.
- **Hábitat.**- Si bien el lugar donde éstas viven de manera más cómoda es por lo general en los intestinos de la mayoría de animales, incluido el ser humano, a diferencia de otras bacterias que son anaerobias y por ende viven estrictamente en ambientes libres de oxígeno, bacterias como la *E. coli* pueden hacerlo también en entornos aerobios facilitando con ello su estudio.
- **Simpleza.**- Por lo general cuando se busca extraer la esencia de un problema se comienza por el caso más simple y esto se aplica perfectamente a las características bacterianas, siendo organismos unicelulares y relativamente más fáciles de tratar.
- **Patogenicidad.**- La mayoría de las cepas de *E. Coli* no afectan al ser humano, siendo parte esencial de la flora intestinal que protege contra otros agentes perjudiciales. Por tanto su trato a nivel experimental no resulta particularmente peligroso.
- **Comportamiento motil.**- Sin duda el aspecto más importante que concierne a este trabajo, su metabolismo, movimiento y la manera de explorar su entorno espacialmente son características del movimiento activo y por ende de un sistema intrínsecamente fuera de equilibrio. Comprender su dinámica tiene un papel preponderante en el entendimiento del movimiento de organismos autopropulsados tanto en lo individual como en lo colectivo.

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

genética viral y bacteriana y manufactura de proteínas con valor comercial, entre otros.

Ahora bien, ¿en qué consiste el movimiento de esta bacteria? En dicho movimiento uno puede apreciar dos procesos: El primero, denominado 'run', consiste en una sincronización filamentaria que impulsa a la bacteria en una trayectoria que para fines prácticos podríamos tomar como recta, presentándose pequeñas desviaciones despreciables debidas a movimiento browniano rotacional. El segundo, 'tumble', es causado por eventos intracelulares estocásticos, los cuales varían la orientación de algunos filamentos que rotan a la bacteria y por tanto cambian su dirección . La combinación alternada de ambos procesos provoca que la partícula lleve a cabo una exploración espacial difusiva.



Figura 2.5: Trayectorias del tipo «run-and-tumble» seguidas por E. Coli vistas en un plano. Nótese el movimiento más persistente a diferencia del caso Browniano pasivo.[4]

Si bien, existe una velocidad constante (autopropulsión), esta puede verse influida por potenciales externos. A este respecto, el modelo RT ha sido utilizado para describir el fenómeno de quimiotaxis por el cual el desplazamiento de las bacterias se da en función de la consecución de nutrientes del entorno, estando estos en mayor o menor concentración en el paisaje inmediato de la partícula. Por supuesto los puntos de mayor concentración de nutrientes atraen a la bacteria mientras que los de menor concentración repelen a la misma. Esto confiere cierto direccionamiento a la partícula restando aleatoriedad al sistema de la misma (Figura 2.6).

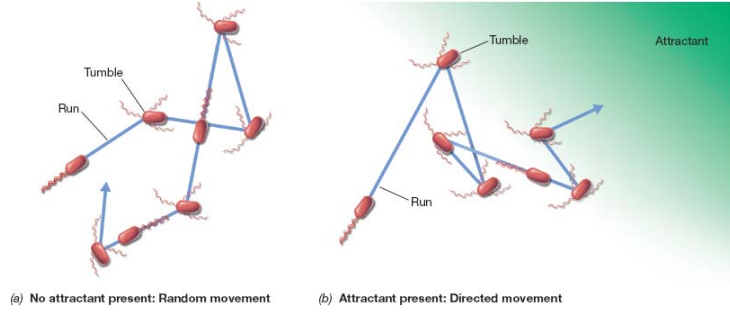


Figura 2.6: Trayectorias RT en un plano. En la mitad izquierda las bacterias no se encuentran sometidas a un potencial siendo aleatorio su movimiento, en la mitad derecha su dinámica se encuentra influida por un potencial del tipo quimiotáctico. [5]

De manera particular en este trabajo se tratará el caso más simple en que la bacteria (partícula activa) se desplaza en una dimensión solamente, es decir sólo puede moverse en las direcciones derecha (R) o izquierda (L). La bacteria se mueve con velocidades dependientes del espacio $v_{R,L}(x)$ para emular desplazamientos en función de un potencial que influye en su movimiento pudiendo ser de naturaleza quimiotáctica o no. El cambio de dirección está dado por la tasa de «tumbling» $\alpha_{R,L}$ en ambas direcciones. El modelo se puede resumir en la Figura 2.7.

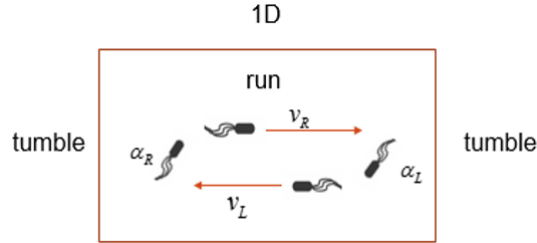


Figura 2.7: Modelo RT unidimensional.

Schnitzer plantea en su trabajo seminal sobre caminatas aleatorias continuas aplicadas a quimiotaxis [33] las siguientes ecuaciones que describen la dinámica RT en una dimensión.

$$\frac{\partial P_R(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} v_R(x) P_R(x, t) - \frac{\alpha_R(x) P_R(x, t)}{2} + \frac{\alpha_L(x) P_L(x, t)}{2} \quad (2.166)$$

$$\frac{\partial P_L(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} v_L(x) P_L(x, t) + \frac{\alpha_R(x) P_R(x, t)}{2} - \frac{\alpha_L(x) P_L(x, t)}{2} \quad (2.167)$$

Es importante notar que las ecuaciones anteriores tienen la misma forma que el sistema para el proceso telegráfico (ecs. 2.160 y 2.161), excepto por un término proveniente del hecho de que en este caso $v_{R,L}(x)$ se encuentra dentro del operador derivada.

La primera ecuación 2.166 nos da la tasa de cambio del número de partículas que se mueven a la derecha en cualquier punto del espacio, siendo lo mismo para 2.167 solo que a la izquierda. Los primeros términos del lado derecho en ambas nos dan cuenta de las inhomogeneidades espaciales de partículas que se mueven a la derecha o a la izquierda, mientras que los segundos y terceros términos se refieren a las probabilidades de que las partículas cambien su dirección a la derecha o a la izquierda.

Sumando 2.166 y 2.167, directamente se puede obtener la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial J(x, t)}{\partial x} \quad (2.168)$$

definiendo con ello la densidad de probabilidad de grano grueso

$$P(x, t) \equiv P_R(x, t) + P_L(x, t) \quad (2.169)$$

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

$$J(x, t) \equiv v_R(x) P_R(x, t) - v_L P_L(x, t) \quad (2.170)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial J(x, t)}{\partial t} + \frac{(\alpha_R + \alpha_L)}{2} J(x, t) = \\ -v_R \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{v_R}{v_R + v_L} J(x, t) \right] + v_L \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{v_L}{v_R + v_L} J(x, t) \right] \\ - (v_R + v_L) \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{v_R v_L}{v_R + v_L} J(x, t) \right] + \frac{\alpha_L v_R - \alpha_R v_L}{2} P(x, t) \end{aligned} \quad (2.171)$$

donde para el caso estacionario se tiene

$$J_{st} = \frac{\frac{1}{2} (\alpha_L v_R - \alpha_R v_L) P_{st}(x) - (v_R + v_L) \frac{d}{dx} \left[\left(\frac{v_R v_L}{v_R + v_L} \right) P_{st}(x) \right]}{\frac{1}{2} (\alpha_R + \alpha_L) + \frac{v_L v'_R - v_R v'_L}{v_R + v_L}} \quad (2.172)$$

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

$$\frac{d}{dx} \left[\left(\frac{v_R v_L}{v_R + v_L} \right) P_{eq}(x) \right] = \frac{\alpha_L v_R - \alpha_R v_L}{2v_R v_L} \left[\left(\frac{v_R v_L}{v_R + v_L} \right) P_{eq}(x) \right] \quad (2.173)$$

cuya solución se obtiene trivialmente, siendo

$$P_{eq}(x) = P(x_0) \left[\frac{v_R(x_0) v_L(x_0)}{v_R(x) v_L(x)} \right] \left[\frac{v_R(x) + v_L(x)}{v_R(x_0) + v_L(x_0)} \right] \exp \left[\int_{x_0}^x \frac{\alpha_L(x') v_R(x') - \alpha_R(x') v_L(x')}{2v_R(x') v_L(x')} dx' \right] \quad (2.174)$$

donde x_0 se refiere a un punto de referencia en el sistema, siendo adoptado en el presente trabajo la convención $x_0 = 0$ por simplicidad en adición a que se confinará a la partícula en potenciales simétricos.

La distribución de equilibrio 2.174 da cuenta de las estrategias quimiotácticas seguidas por la bacteria. Por supuesto dicha distribución será mayor en las zonas de mayor concentración de nutrientes, para conseguir alcanzar dichas zonas la bacteria puede disminuir su tasa de cambios, es decir su dirección persistente y/o incrementar su velocidad.

En el siguiente capítulo se continúa el desarrollo anterior dando expresiones explícitas a las velocidades $v_{R,L}$ y las tasas de cambio $\alpha_{R,L}$ relacionándolas a un potencial externo que determina la zona de movimiento de las partículas haciendo las veces de cierta zona de nutrientes abundantes que de alguna manera «confinaría» a la partícula a permanecer más tiempo en dicha zona disminuyendo la probabilidad de encontrar partículas conforme uno se aleja de la misma. Por supuesto, estos potenciales confinantes pueden estar relacionados a otro tipo de potenciales influyendo a la partícula tales como del tipo electromagnético o térmicos .

Capítulo 3

Difusión efectiva e inhomogeneidad

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

3.1. Conexión entre caso pasivo y activo: difusión efectiva

Retomemos la ecuación 2.171, en ésta podemos encontrar los siguientes términos

$$v_R(x) + v_L(x) \tag{3.1}$$

y

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

así como

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

En el caso de 3.1 y 3.2, éstos pueden ser asociados con la descripción de grano grueso en la densidad de probabilidad 2.169, con las definiciones

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

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

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

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

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

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

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

donde se definen la velocidad de «drift»

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

el término de *difusión efectiva* dependiente de la posición

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

y

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

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

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

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

Por otro lado la difusión efectiva, cantidad relevante del presente análisis, tiene una expresión análoga a la conocida usualmente en la literatura para el caso de partículas RT no confinadas difundiéndose libremente con tasas de cambio iguales en ambas direcciones. Este caso particular se caracteriza por mostrar una difusión del tipo balístico a tiempos cortos mientras que en el límite de tiempos largos se tiene una difusión efectiva constante dada por la expresión

$$D_{free} = v_0^2/\alpha \quad (3.12)$$

con la diferencia de que en el presente caso, las velocidades en ambas direcciones así como la tasa de cambio en la dirección son *dependientes de la posición*. Dicha expresión refleja el hecho de que la partícula se difunde en ambas direcciones debido al cambio aleatorio en la dirección $\alpha(x)$. Por último $\mathcal{M}(x)$ es un término adimensional que surge de la manipulación algebraica hecha.

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

$$0 = \mathcal{V}_{drift}(x) P_{eq}(x) - \frac{d}{dx} \mathcal{D}(x) P_{eq}(x) \quad (3.13)$$

cuya solución se obtiene trivialmente y está dada por

$$P_{eq}(x) = \frac{\mathcal{N}(0)}{\mathcal{D}(x)} \exp \left\{ \int^x dx' \frac{\mathcal{V}_{drift}(x')}{\mathcal{D}(x')} \right\} \quad (3.14)$$

Es en este punto donde se ve claramente la conexión entre el caso activo y pasivo. La solución de equilibrio en una dimensión para partículas activas que exhiben patrones de movimiento «run-and-tumble» es precisamente la solución estacionaria correspondiente a una ecuación de Smoluchowski que describe partículas Brownianas pasivas en un medio inhomogéneo (ec. 2.137) como se vio en el capítulo anterior. A diferencia del caso ordinario, se ha conferido al medio inhomogeneidad a través de la difusión/temperatura efectiva, propuesta en la sección 2.1.6 referente a equilibrio local, que da cuenta de las propiedades estocásticas de la partícula en el mismo. Ahora bien, no hay impedimento para que estas cantidades codifiquen las propiedades dinámicas estocásticas propias del movimiento activo. Por tanto, es precisamente la difusión/temperatura efectiva la cantidad que conecta ambos tipos de movimiento.

Resumamos lo hecho hasta este momento; se partió de las ecuaciones 2.166 y 2.167, las cuales describen la particular dinámica «run-and-tumble»

observada en cierto tipo de partículas Brownianas *activas*, a saber, bacterias. Con dichas ecuaciones se obtuvo la expresión 2.171 para la función de corriente $J(x, t)$, expresión a partir de la cual considerando solamente el caso en que la corriente es independiente del tiempo y la posición, es decir una corriente estacionaria constante, se obtuvo una relación entre la corriente J_{st} y la densidad de probabilidad estacionaria P_{st} (ec. 2.172). Posteriormente suponiendo que esta corriente en adición es nula se obtuvo finalmente la expresión 3.13 cuya solución de equilibrio (ec. 3.14) es equivalente a la solución estacionaria para partículas Brownianas pasivas difundiéndose en un medio con propiedades no uniformes (ec. 2.137). En resumen se partió de ecuaciones generales que describen cierto tipo de patrones de movimiento en partículas activas, simplificando dichas ecuaciones al considerar solamente el caso estacionario y de corriente cero.

En este punto nos remitimos a la expresión expuesta en el capítulo anterior (ec. 2.136), deducida por Matsuo. Físicamente ésta corresponde a la descripción de la evolución probabilística de la posición de partículas Brownianas pasivas difundiéndose en un medio no isotérmico en el régimen sobreamortiguado (Ec. Smoluchowski). Ahora, suponiendo válida la relación 2.134, podemos asociar un término de difusión/temperatura efectiva dependiente del espacio a esta descripción pasiva. En adición, sabemos que se puede derivar una ecuación de Langevin en el régimen sobreamortiguado equivalente a la ecuación obtenida por Matsuo [25], relacionando con ello una descripción a través de una ecuación diferencial estocástica.

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

- ¿Se corresponderán exactamente ambos casos o habrá alguna diferencia?
- ¿Podríamos distinguir con base en el comportamiento difusivo si se trata de uno u otro caso?
- ¿Se puede tratar el caso particular de una partícula que exhibe el patrón «run-and-tumble» (activo) utilizando simplemente la teoría empleada para el caso pasivo considerando inhomogeneidades en el medio circundante a través de propiedades dependientes de la posición (difusión efectiva)?

3.2. Análisis

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

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

Como se explicó en la sección anterior en este caso se utiliza un enfoque del tipo Einstein-Smoluchowski tomando en extenso la teoría de patrones dinámicos RT para obtener una solución estacionaria en términos de la densidad de probabilidad, considerando una corriente nula. La solución (distribución de probabilidad) a partir de estas consideraciones se desarrollará para cada potencial confinante de la partícula.

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

Se emplea un enfoque Ornstein-Uhlenbeck a través de la de la ecuación de Langevin para el caso sobreamortiguado correspondiente a la ecuación de Smoluchowski 2.129 referida al caso de un baño térmico inhomogéneo. En dicha ecuación estocástica se introduce la difusión dependiente del espacio (ec. 3.9), en términos de cantidades que dan cuenta de las propiedades de autopropulsión y persistencia inherentes al movimiento activo. La ecuación de Langevin se resuelve numéricamente obteniendo posteriormente la densidad de probabilidad correspondiente a los procesos de desplazamiento obtenidos en dicha ecuación.

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

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

3.3. Caso activo: «run-and-tumble»

En esta sección se detalla el tratamiento cuyo fin es obtener la densidad de probabilidad en el caso con independencia temporal y corriente nula. Para ello se desarrolla en extenso la teoría expuesta en la sección 2.3.

Se parte de la solución obtenida a partir de las ecuaciones que describen el tipo de patrones dinámicos en cuestión, ecs. 2.166 y 2.167. Es importante subrayar que dicha solución (ec. 2.174), se refiere como solución de equilibrio aunque dicha denominación simplemente se refiere a que la corriente es cero, $J_{st} = 0$, lo cual por supuesto no debe asociarse a un equilibrio en el sentido termodinámico.

Pues bien, retomando la solución de equilibrio 2.174

$$P_{eq}(x) = P(x_0) \left[\frac{v_R(x_0) v_L(x_0)}{v_R(x) v_L(x)} \right] \left[\frac{v_R(x) + v_L(x)}{v_R(x_0) + v_L(x_0)} \right] \exp \left[\int_{x_0}^x \frac{\alpha_L(x') v_R(x') - \alpha_R(x') v_L(x')}{2v_R(x') v_L(x')} dx' \right] \quad (3.15)$$

a continuación se establecen las pautas a seguir para los términos correspondientes a las velocidades que la partícula adquiere en ambas direcciones $v_{R,L}(x)$ así como la tasa de cambio en la dirección $\alpha_{R,L}(x)$.

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

$$\alpha_R \equiv \alpha_L \equiv \alpha \quad (3.16)$$

En lo referente a la velocidad de la partícula activa, ésta tendrá una velocidad constante v_0 , la cual se ve influida por la presencia de un potencial externo confinante cuyo origen podría ser debido a cierto gradiente en la concentración de nutrientes (quimiotáctico) o una barrera física, por citar algunos ejemplos. Con esto las expresiones para la velocidad son

$$v_R(x) = v_0 + \mu f(x) \quad (3.17)$$

$$v_L(x) = v_0 - \mu f(x) \quad (3.18)$$

donde μ se refiere a la movilidad de la partícula y $f(x)$ a la fuerza asociada al potencial confinante $U(x)$ dada por la expresión

$$f(x) = -\frac{dU(x)}{dx} \quad (3.19)$$

Así, las velocidades a la izquierda y derecha se toman de la siguiente manera

$$v_R(x) = v_0 - \mu \frac{dU(x)}{dx} \quad (3.20)$$

$$v_L(x) = v_0 + \mu \frac{dU(x)}{dx} \quad (3.21)$$

Volviendo a la solución de equilibrio 3.15, ésta se puede escribir en términos de las definiciones dadas anteriormente

$$P_{\text{eq}}(x) = \frac{\mathcal{N}(0)}{1 - \frac{\mu^2}{v_0^2} [U'(x)]^2} \exp \left\{ - \int_0^x dx' \frac{\mu U'(x')}{\frac{v_0^2}{\alpha} \left[1 - \frac{\mu^2}{v_0^2} [U(x')]^2 \right]} \right\} \quad (3.22)$$

donde se ha tomado $x_0 = 0$ como punto de referencia. En este punto nos remitimos a las definiciones para la velocidad de «drift» (ec. 3.8) y la difusión efectiva (ec. 3.9). Si sustituimos las definiciones 3.16 y 3.20-3.21 en aquella de la velocidad de «drift», obtenemos que esta última esta dada por

$$\mathcal{V}(x)_{\text{drift}} = -\mu \frac{dU(x)}{dx} \quad (3.23)$$

la cual como ya se había adelantado en secciones anteriores es el mismo término que aparece en la ecuación de Smoluchowski para una partícula Browniana pasiva en contacto con un medio no isotérmico.

La difusión efectiva es

$$\mathcal{D}(x) = \frac{v_0^2}{\alpha} \left\{ 1 - \frac{\mu^2}{v_0^2} \left[\frac{dU(x)}{dx} \right]^2 \right\} \quad (3.24)$$

En este punto también se plantea la identificación con la expresión para el teorema de fluctuación-disipación (ec. 2.128) en la cual se asume el equilibrio solo a nivel local, lo cual como se mencionó en la sección 2.6., no se cumple en este caso dada la uniformidad en la movilidad. La discusión de este punto se deja para el análisis posterior en este capítulo. Suponiendo dicha relación

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

la expresión 3.24 se puede escribir como

$$\mathcal{T}(x) = T_0 \left\{ 1 - \frac{\mu^2}{v_0^2} \left[\frac{dU(x)}{dx} \right]^2 \right\} \quad (3.26)$$

donde

$$T_0 = \frac{D_{\text{free}}}{\mu k_B} \quad (3.27)$$

La expresión 3.26 se refiere a una temperatura dependiente de la posición (perfil de temperatura). En este punto es posible establecer una conexión a nivel físico entre el caso activo y el caso pasivo. Como se verá en el tratamiento para partículas desplazándose en ciertos potenciales, éstas tienden a «nadar» hacia las orillas cuando se encuentran confinadas dados los efectos de persistencia en su movimiento; no es de extrañar que sea precisamente un perfil de temperatura cuyo valor sea máximo en cierta zona lo que produzca el alejamiento de partículas Brownianas pasivas hacia una región «menos caliente» imitando con ello el movimiento observado en sus análogos activos. Precisamente esto se observa en 3.26, para valores mínimos del potencial, los cuales son simétricos en nuestro caso, las regiones correspondientes a éstos tienen una temperatura efectiva máxima, a saber, T_0 , por lo que cabría esperar que las partículas Brownianas pasivas pasen menos tiempo ahí o en términos estadísticos, sea menos probable encontrarlas en dichas zonas tendiendo a acumularse en las paredes. Como veremos precisamente estos máximos de temperatura coinciden con zonas en las distribuciones de probabilidad donde es poco probable encontrar partículas cuando estas se mueven con longitudes de persistencia grandes, acumulándose éstas en las fronteras del confinamiento.

El entrecomillado se debe a que como se mencionó en 2.1.6, esta temperatura efectiva no es una temperatura en el sentido usualmente empleado, más bien es una cantidad que da cuenta de las propiedades en la dinámica de las partículas donde dicha dinámica podría estar relacionada a una temperatura en el sentido de aquella que uno mide directamente en el medio circundante con un termómetro.

Regresando a la solución de equilibrio 3.22, ésta se puede expresar en términos de las dos expresiones anteriores, con excepción del denominador en el término fuera de la función exponencial. Sin pérdida de generalidad se puede multiplicar y dividir por v_0^2/α en el denominador, agregando el término restante a la constante de normalización. Con lo anterior 3.22 se puede expresar como

$$P_{\text{eq}}(x) = \frac{\mathcal{N}(0)}{\mathcal{D}(x)} \exp \left\{ \int_0^x dx' \frac{\mathcal{V}_{\text{drift}}(x')}{\mathcal{D}(x')} \right\} \quad (3.28)$$

Siendo la expresión antes mencionada en la sección anterior correspondiente a la conexión entre el caso pasivo y activo. Esta última expresión reviste especial importancia al desarrollarse para cada uno de los potenciales confinantes de las partículas RT.

Por otro lado, si expresamos explícitamente $\mathcal{V}(x)_{\text{drift}}$, la distribución de

probabilidad es

$$P_{\text{eq}}(x) = \frac{\mathcal{N}(0)}{\mathcal{D}(x)} \exp \left\{ - \int_0^x dx' \frac{\mu U'(x')}{\mathcal{D}(x')} \right\} \quad (3.29)$$

la cual por supuesto es una distribución no-Boltzmann-Gibbs, sin embargo, si se considera una difusión homogénea D , 3.28 es en esencia la distribución de Boltzmann-Gibbs

$$P_{\text{B-G}}(x) = \frac{1}{Z} \exp \left\{ - \frac{G(x)}{D} \right\} \quad (3.30)$$

donde la función de partición Z vendría dada por

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \exp \left\{ - \frac{G(x')}{D} \right\} \quad (3.31)$$

la cual recuerda a la función de partición canónica de una partícula. Además si se toma el límite difusivo en la expresión 3.29, o sea $v \rightarrow \infty$ y $\alpha \rightarrow \infty$; ésta se reduce a la distribución de Boltzmann-Gibbs.

Posteriormente en la sección 3.6 esto se estudia con mayor detalle además de profundizar en la expresión 3.28 y la naturaleza intrínseca fuera de equilibrio contenida en este tipo de expresión no-Boltzmann-Gibbs.

3.4. Caso pasivo: ecuación de Langevin

Retomemos la ecuación de Smoluchowski para una partícula Browniana *pasiva* moviéndose en un medio caracterizado por una temperatura efectiva inhomogénea (ec. 2.131)

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} \left[-\mu U'(x) P(x, t) - \mu \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{T}(x) P(x, t) \right] \quad (3.32)$$

Dicho régimen sobreamortiguado también se puede obtener rigurosamente a través de la descripción de Langevin en el nivel de una sola realización [25], siendo equivalente a la ecuación diferencial estocástica

$$\frac{dx(t)}{dt} = -\mu U'(x) + \sqrt{\mathcal{T}(x)} \xi(t) \quad (3.33)$$

la cual corresponde al régimen sobreamortiguado. Con las propiedades del ruido blanco Gaussiano

$$\langle \xi_x(t) \rangle = 0 \quad (3.34)$$

$$\langle \xi_x(t) \xi_x(t') \rangle = 2\mu k_B \delta(t - t') \quad (3.35)$$

donde se ha supuesto la identificación

$$\mathcal{D}(x) = \frac{k_B \mathcal{T}(x)}{\gamma} = \mu k_B \mathcal{T}(x) \quad (3.36)$$

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

$$\frac{dx(t)}{dt} = -\mu U'(x) + \sqrt{2\mathcal{D}(x)} \xi(t) \quad (3.37)$$

con las propiedades del ruido

$$\langle \xi_x(t) \rangle = 0 \quad (3.38)$$

$$\langle \xi_x(t) \xi_x(t') \rangle = \delta(t - t') \quad (3.39)$$

donde dicha difusión efectiva dada por 3.24 codifica las propiedades dinámicas características del movimiento activo.

Por supuesto, para contrastar con el caso activo se requieren las distribuciones de probabilidad correspondientes, las cuales surgen al considerar el ensamble del conjunto de realizaciones del sistema. La solución a esta ecuación se puede aproximar mediante la expansión en Taylor de una variable. En este caso se utilizó la aproximación de orden más bajo (Esquema de Euler) [34]. Con ello se obtiene

$$\Delta \mathbf{x} = -\mu U'(x) \Delta t + \sqrt{2\mathcal{D}(x)} \Delta t \Psi \quad (3.40)$$

Esta ecuación se resolvió utilizando el algoritmo de Euler explícito expresado de forma general como

$$x(t) \approx x(t_0) + a(x(t_0))(t - t_0) + b(x(t_0)) [W(t) - W(t_0)] \quad (3.41)$$

Para el código de solución de 3.40 referirse al apéndice.

3.5. Aplicación a potenciales característicos

El estudio por cada potencial se divide en la parte correspondiente a una partícula browniana activa que exhibe dinámica run-and-tumble bajo la influencia de cierto potencial externo y aquella para una partícula Browniana pasiva desplazándose en un medio no isotérmico, sometida al mismo potencial. Posteriormente se contrastan los comportamientos difusivos a través de la densidad de probabilidad obtenida en cada caso.

3.5.1. Potencial lineal

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

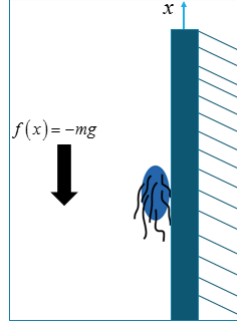


Figura 3.1: E. coli desplazándose ante la influencia del campo gravitacional.

En este caso el potencial está dado por

$$U(x) = mgx \quad (3.42)$$

siendo m la masa de la partícula. Alrededor de este sistema se han hecho varios estudios, abarcando desde la solución para partículas RT en una dimensión [33] [35] y dimensiones mayores [36], hasta el estudio experimental en tres dimensiones [37]. Debido a este análisis exhaustivo aquí sólo se expondrá brevemente el caso estacionario de movimiento RT con el fin de ejemplificar el tratamiento con algunas de las expresiones desarrolladas en la sección 3.3.

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

$$\mathcal{V}_{\text{drift}}(x) = v_{\text{sed}} = -\mu mg \quad (3.43)$$

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

$$\mathcal{D} = \frac{v_0^2}{\alpha} \left[1 - \frac{\mu^2 m^2 g^2}{v_0^2} \right] = \frac{v_0^2}{\alpha} \left[1 - \frac{v_{\text{sed}}^2}{v_0^2} \right] \quad (3.44)$$

Para este sistema es simple emplear el potencial en la solución de equilibrio 3.22, obteniéndose

$$P_{\text{eq}}(x) = \frac{\mathcal{N}(0)}{1 - \frac{\mu^2 m^2 g^2}{v_0^2}} \exp \left\{ - \int_0^x dx' \frac{\mu mg}{\frac{v_0^2}{\alpha} \left[1 - \frac{\mu^2 m^2 g^2}{v_0^2} \right]} \right\} \quad (3.45)$$

cuyo término exponencial se integra trivialmente

$$P_{\text{eq}}(x) = \frac{\mathcal{N}(0)}{1 - \frac{\mu^2 m^2 g^2}{v^2}} \exp \left\{ -\frac{\mu m g}{\frac{v^2}{\alpha} \left[1 - \frac{\mu^2 m^2 g^2}{v^2} \right]} x \right\} \quad (3.46)$$

Por supuesto esta distribución de probabilidad debe normalizarse

$$\int_0^\infty dx P_{\text{eq}}(x) = 1 \quad (3.47)$$

$$\mathcal{N}(0) = mg\mu \frac{\alpha}{v^2} \quad (3.48)$$

Por tanto la densidad de probabilidad normalizada es

$$P_{\text{eq}}(x) = \frac{mg}{\frac{v^2}{\mu\alpha} \left(1 - \frac{\mu^2 m^2 g^2}{v^2} \right)} \exp \left\{ -\frac{mg}{\frac{v^2}{\mu\alpha} \left[1 - \frac{\mu^2 m^2 g^2}{v^2} \right]} x \right\} \quad (3.49)$$

Esta puede reescribirse para utilizando la expresión para la temperatura efectiva (ec. 3.26) como

$$P_{\text{eq}}(x) = \frac{mg}{k_B T_0 \left(1 - \frac{v_{\text{sed}}^2}{v_0^2} \right)} \exp \left[-\frac{mg}{k_B T_0 \left(1 - \frac{v_{\text{sed}}^2}{v_0^2} \right)} x \right] \quad (3.50)$$

Análisis

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

$$\mathcal{T} = T_0 \left\{ 1 - \frac{v_{\text{sed}}^2}{v_0^2} \right\} \quad (3.51)$$

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

3.5.2. Potencial armónico

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

El potencial viene dado por

$$U(x) = \frac{1}{2}kx^2 \quad (3.52)$$

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

$$U'(x) = kx \quad (3.53)$$

Caso activo: «run-and-tumble»

Sustituyendo en la expresión 3.22 se tiene

$$P_{\text{eq}}(x) = \frac{\mathcal{N}(0)}{1 - \frac{\mu^2}{v_0^2}k^2x^2} \exp \left[-\frac{\alpha}{v_0^2} \int_0^x dx' \frac{\mu k x'}{\left(1 - \frac{\mu^2}{v_0^2}k^2x'^2\right)} \right] \quad (3.54)$$

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

$$P_{\text{eq}}(x) = \frac{\mathcal{N}(0)}{1 - \frac{\mu^2}{v_0^2}k^2x^2} \exp \left[\frac{\alpha}{2\mu k} \int_0^u \frac{du}{u} \right] \quad (3.55)$$

Entonces

$$P_{\text{eq}}(x) = \frac{\mathcal{N}(0)}{1 - \frac{\mu^2}{v_0^2}k^2x^2} \exp \left[\frac{\alpha}{2\mu k} \ln \left(1 - \frac{\mu^2}{v_0^2}k^2x^2 \right) \right] \quad (3.56)$$

o lo que es lo mismo

$$P_{\text{eq}}(x) = \mathcal{N}(0) \left(1 - \frac{\mu^2}{v_0^2}k^2x^2 \right)^{\frac{\alpha}{2\mu k} - 1} \quad (3.57)$$

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

$$1 - \frac{\mu^2}{v_0^2}k^2x^2 \geq 0 \quad (3.58)$$

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

$$|x| = \frac{v}{\mu k} \quad \text{ó} \quad -\frac{v}{\mu k} \leq x \leq \frac{v}{\mu k} \quad (3.59)$$

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

$$|U'(x_m)| = \frac{v_0}{\mu} \quad (3.60)$$

siendo para este potencial

$$kx_m = \frac{v_0}{\mu} \quad (3.61)$$

es decir

$$x_m = \frac{v_0}{\mu k} \quad (3.62)$$

En adición, esta longitud que caracteriza al movimiento se puede utilizar para adimensionalizar y con ello escalar la región de movimiento en términos de la variable $\bar{x} = \frac{x}{x_m}$ siendo ésta ahora $\bar{x} \in [-1, 1]$. Con esta nueva variable la densidad de probabilidad 3.57 se reescribe como

$$P_{\text{eq}}(x) = \mathcal{N}(0) (1 - \bar{x}^2)^{\frac{\alpha}{2\mu k} - 1} \quad (3.63)$$

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

$$\mathcal{N}(0) \frac{v_0}{\mu k} \int_{-1}^1 d\bar{x} (1 - \bar{x}^2)^{\frac{\alpha}{2\mu k} - 1} = 1 \quad (3.64)$$

de donde la solución de la integral definida es

$$\int_{-1}^1 d\bar{x} (1 - \bar{x}^2)^{\frac{\alpha}{2\mu k} - 1} = \frac{\sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{\alpha}{2\mu k}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{\alpha}{2\mu k}\right)} \quad (3.65)$$

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

$$P_{\text{eq}}(\bar{x}) = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{\alpha}{2\mu k}\right)}{x_m \sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{\alpha}{2\mu k}\right)} (1 - \bar{x}^2)^{\frac{\alpha}{2\mu k} - 1} \quad (3.66)$$

Esta densidad de probabilidad está caracterizada por el parámetro

$$\beta = \frac{\alpha}{2\mu k} \quad (3.67)$$

Veamos ahora el significado de éste.

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

$$l_p \equiv \frac{v_0}{\alpha} \quad (3.68)$$

. Un valor grande de α significa un cambio constante en la dirección lo cual implica que se mantiene por poco tiempo la dirección; por el contrario, un valor pequeño de α implica que la partícula mantiene por más tiempo su dirección siendo mayor su longitud de persistencia. Lo anterior es evidente de la definición 3.68. Así, la interpretación de β se vuelve más clara en términos de una relación de longitudes lo cual se obtiene al multiplicar y dividir 3.67 por la velocidad de autopropulsión v_0 .

$$\beta^* = \frac{\alpha v_0}{2v_0\mu k} \quad (3.69)$$

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

$$\beta^* = \frac{\text{longitud característica}}{2 \times \text{longitud de persistencia}} \quad (3.70)$$

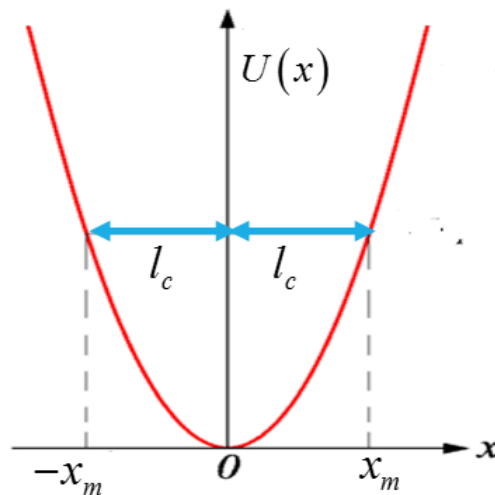


Figura 3.2: Potencial armónico visto desde un punto de vista cualitativo. Se indican los puntos de confinamiento y la longitud característica del sistema.

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

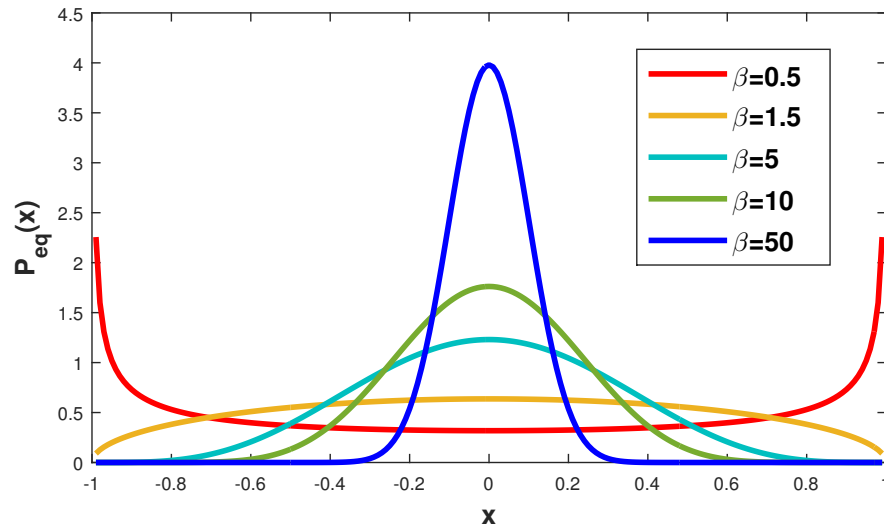


Figura 3.3: Densidades de probabilidad de «equilibrio» para distintos valores del parámetro β .

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

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

Por el contrario, un valor grande de β está relacionado a una marcada diferencia entre la longitud característica y la longitud de persistencia. Por ejemplo, en el caso de $\beta = 50$ la longitud de persistencia es una centésima parte de la longitud característica. Un movimiento de este tipo es más cercano a aquél de una partícula Browniana pasiva ordinaria poco persistente, por

lo cual estas distribuciones son más cercanas a una distribución Gaussiana, concentrándose la probabilidad de encontrar a las partículas en la región central del potencial.

Caso pasivo: difusión efectiva

Ahora se estudia un sistema físicamente distinto al anterior. En este caso se tienen partículas Brownianas pasivas difundiéndose en una dimensión en un medio no isotérmico sometidas a la influencia de un potencial armónico. Ahora bien, como se ha mencionado anteriormente el mecanismo exacto de acoplamiento entre la partícula y el medio circundante el cual estaría dado por la relación FD local es desconocido. Sin embargo en principio se puede suponer que tanto el medio como la partícula están descritos sólo a nivel de su dinámica estocástica por estas cantidades efectivas (difusión y temperatura) relacionadas a través de una movilidad μ uniforme, lo cual se discutirá en términos generales más adelante.

La difusión efectiva para este sistema está dada por

$$\mathcal{D}(x) = \frac{v_0^2}{\alpha} \left(1 - \frac{\mu^2}{v_0^2} k^2 x^2 \right) \quad (3.71)$$

la cual se utiliza en la ecuación 3.40, obteniéndose

$$\Delta x = -\mu k x \Delta t + \sqrt{\frac{2v_0^2}{\alpha} \left(1 - \frac{\mu^2}{v_0^2} k^2 x^2 \right)} \Delta t \Psi \quad (3.72)$$

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

$$\bar{x} = \frac{x}{x_m} = \frac{\mu k}{v} x \quad (3.73)$$

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

$$\bar{t} = \mu k t \quad (3.74)$$

Con estas identificaciones, la expresión adimensionalizada a resolver es

$$\Delta \bar{x} = -\bar{x} \Delta \bar{t} + \sqrt{\frac{2\mu k}{\alpha} (1 - \bar{x}^2)} \Delta \bar{t} \Psi \quad (3.75)$$

Nuevamente en este caso aparece el parámetro adimensional β . Como se mencionó previamente se obtienen las distribuciones de probabilidad al considerar

el ensamble del conjunto de realizaciones para este proceso. Las distribuciones de probabilidad obtenidas se muestran en la Figura 3.4.

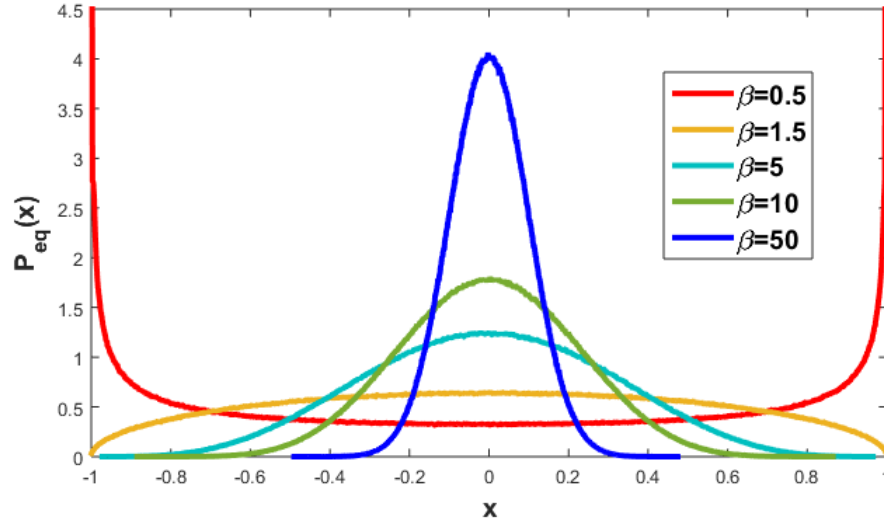


Figura 3.4: Distribuciones de probabilidad para partículas Brownianas pasivas difundiéndose en un medio inhomogéneo no isotérmico.

El análisis para la variación de las distribuciones en función del parámetro β es el mismo que el hecho para la Figura 3.3, sin embargo en este caso reviste importancia la interpretación desde el punto de vista del perfil de temperatura efectiva que en principio puede dar cuenta de un perfil de temperatura en el medio circundante de la partícula Browniana pasiva. La temperatura efectiva dependiente del espacio asociada a la difusión está dada por

$$\mathcal{T}(x) = T_0 \left[1 - \frac{\mu^2}{v_0^2} k^2 x^2 \right] \quad (3.76)$$

Este potencial tiene su valor mínimo en $x = 0$, siendo la temperatura efectiva máxima en este punto, a saber, T_0 . Recordemos que aquí las partículas no son activas, pero se comportan de la misma manera que lo haría su contraparte activa, la cual como vimos en el análisis anterior tiende dadas sus características persistentes de movimiento a acumularse en las paredes. En este caso dicha tendencia a que sea más probable encontrar a las partículas cerca de las paredes de potencial, se puede explicar en función del impacto que causan estos «puntos calientes» asociados a las propiedades estocásticas de movimiento tanto de la partícula como del medio en que se encuentra embebida. Dicha región «caliente» empujaría a las partículas Brownianas hacia

los puntos cercanos a las paredes que las confinan, a saber, los puntos x_m (ver Figura 3.5).

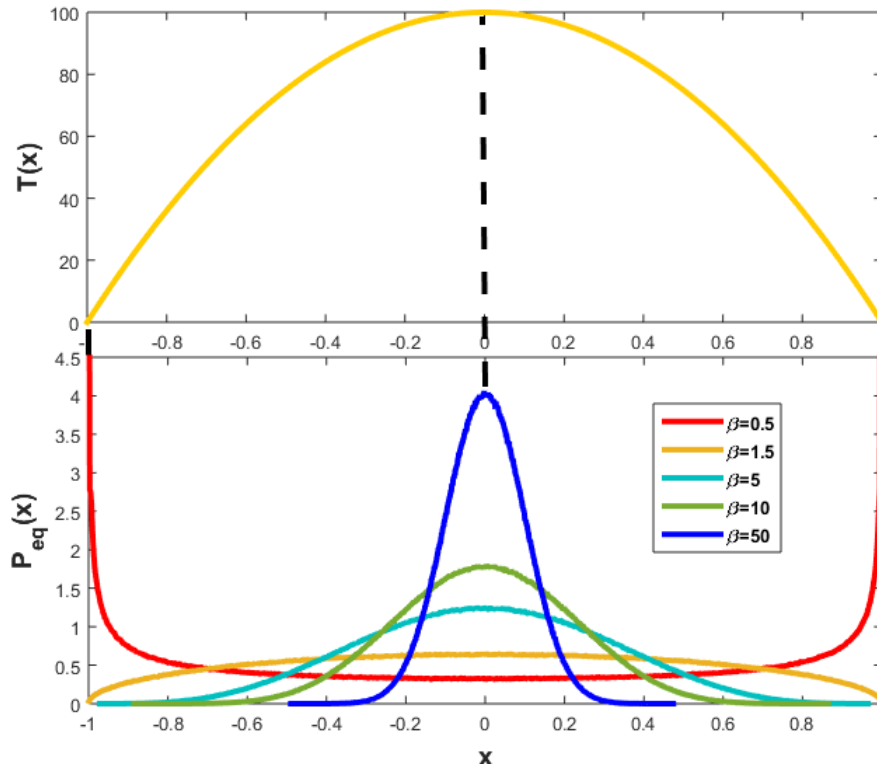


Figura 3.5: Distribuciones de probabilidad para partículas Brownianas difundiendo en un medio inhomogéneo no isotérmico. Se contrasta el perfil de temperatura del medio con las distribuciones de probabilidad.

Siendo precisamente esta inhomogeneidad en la temperatura efectiva la característica que dota a la partícula Browniana pasiva de características propias del movimiento activo. Como se apreció en el caso de partículas activas, conforme más marcadas son sus propiedades de movimiento activo, a saber, persistencia, es más probable encontrarlas en las regiones cercanas a las paredes del potencial. En el caso de las partículas Brownianas estos sucede debido a que éstas se alejan de los puntos calientes en el sistema.

Caso activo vs caso pasivo

Como se pudo ver en los análisis anteriores los comportamientos difusivos en ambos casos se corresponden exactamente. Lo anterior queda de manifiesto

en la Figura 3.6 en la cual se encuentran superpuestas las distribuciones de probabilidad para ambos casos.

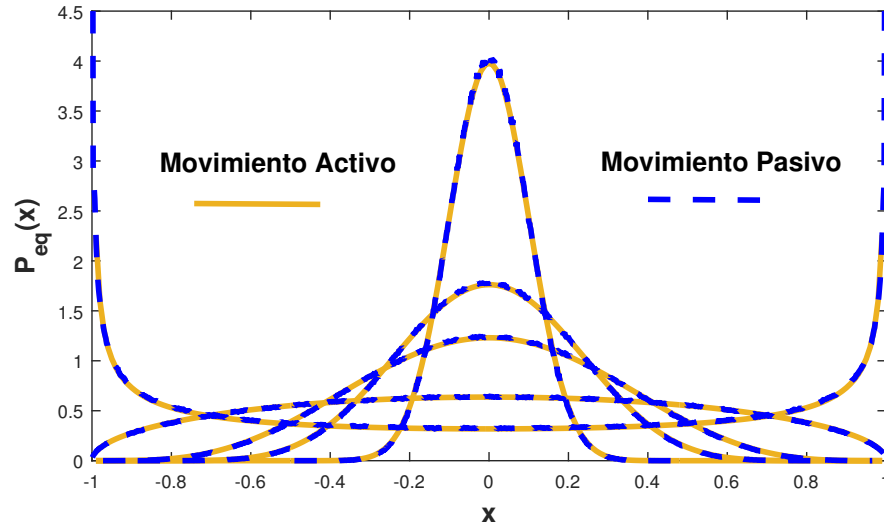


Figura 3.6: Comparación de las distribuciones de probabilidad obtenidas para partículas activas que exhiben patrones de movimiento RT y aquellas para partículas pasivas moviéndose en un medio con temperatura inhomogénea.

Con esto se puede concluir que el comportamiento difusivo es indistinguible cuando se contrastan las distribuciones de probabilidad de partículas activas RT difundiéndose en una dimensión suponiendo $J_{st} = 0$ y aquellas que resultan del movimiento de partículas pasivas en un medio inhomogéneo no isotérmico.

3.5.3. Potencial de doble pozo

El potencial en este caso se expresa como

$$U(x) = \Delta E \left(\frac{x^4}{L^4} - 2\frac{x^2}{L^2} \right) \quad (3.77)$$

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

$$U'(x) = \frac{4\Delta E}{L} \frac{x}{L} \left(\frac{x^2}{L^2} - 1 \right) \quad (3.78)$$

Caso activo: «run-and-tumble»

Utilizando la derivada del potencial en 3.22 se obtiene la distribución de probabilidad de equilibrio

$$P_{\text{eq}}(x) = \frac{\mathcal{N}(0)}{1 - \frac{16\Delta E^2 \mu^2}{v_0^2 L^2} \frac{x^2}{L^2} \left(\frac{x^2}{L^2} - 1\right)^2} \exp \left\{ -\frac{\alpha}{v_0^2} \int_0^x dx' \frac{\frac{4\mu\Delta E}{L} \frac{x'}{L} \left(\frac{x'^2}{L^2} - 1\right)}{\left[1 - \frac{16\Delta E^2 \mu^2}{v_0^2 L^2} \frac{x'^2}{L^2} \left(\frac{x'^2}{L^2} - 1\right)^2\right]} \right\} \quad (3.79)$$

Para que ésta última sea positiva definida se requiere

$$1 - \frac{16\Delta E^2 \mu^2}{v_0^2 L^2} \frac{x^2}{L^2} \left(\frac{x^2}{L^2} - 1\right)^2 \geq 0 \quad (3.80)$$

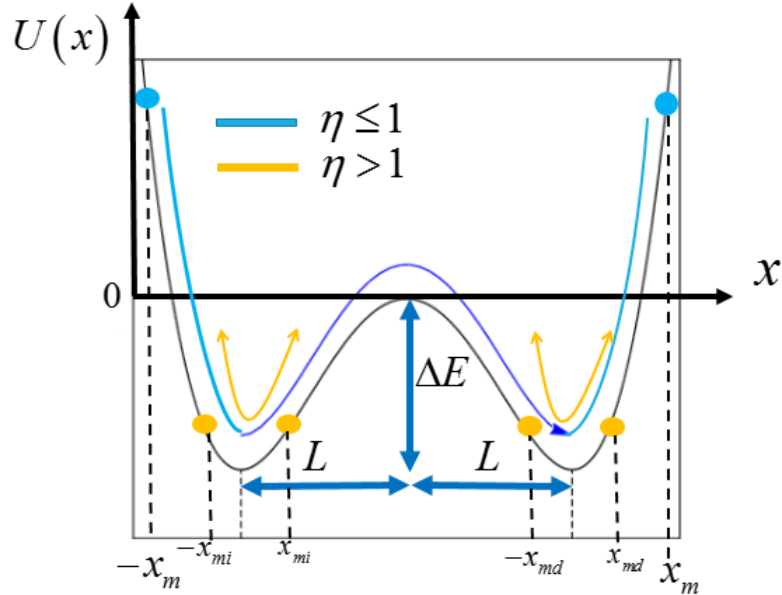


Figura 3.7: Potencial de doble pozo ilustrando cualitativamente las cantidades involucradas en su descripción. Para $\eta \leq 1$ se muestra el desplazamiento libre entre ambos pozos de potencial. Cuando $\eta > 1$ la partícula el movimiento de la partícula se encuentra confinado a las regiones correspondientes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

Si observamos con más detalle la condición 3.80 estrictamente matemática, ésta se corresponde físicamente con que la fuerza autopropulsiva de la partícula supere a la de atrapamiento que confiere el potencial

$$|f_{\text{atrapamiento}}| < |f_{\text{autopropulsiva}}| \quad (3.81)$$

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

$$|-U'(x_m)| = \left| \frac{v_0}{\mu} \right| \quad (3.82)$$

en este caso

$$\frac{4\Delta E}{L} \frac{x_m}{L} \left(\frac{x_m^2}{L^2} - 1 \right) = \frac{v_0}{\mu} \quad (3.83)$$

La solución real a esta ecuación es

$$x_m = \frac{2\Delta E L^2}{3^{\frac{1}{3}} \left[3^2 \Delta E^2 L^4 \frac{v_0}{\mu} + 3^{\frac{1}{2}} \left(3^3 \Delta E^4 L^8 \frac{v_0^2}{\mu^2} - 4^3 \Delta E^6 L^6 \right)^{\frac{1}{2}} \right]^{\frac{1}{3}} + \frac{\left[3^2 \Delta E^2 L^4 \frac{v_0}{\mu} + 3^{\frac{1}{2}} \left(3^3 \Delta E^4 L^8 \frac{v_0^2}{\mu^2} - 4^3 \Delta E^6 L^6 \right)^{\frac{1}{2}} \right]^{\frac{1}{3}}}{2 \cdot 3^{\frac{2}{3}} \Delta E}} \quad (3.84)$$

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

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

En el presente análisis el interés se centra en el primer tipo de movimiento, a saber, las partículas desplazándose libremente entre ambos pozos, lo cual se refiere al caso en que la fuerza autopropulsiva es mayor a la fuerza de atrapamiento que suponen ambos pozos, es decir, precisamente cuando se cumple la condición 3.81.

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

$$\bar{x} = \frac{x}{x_m} \quad (3.85)$$

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

Volviendo a la condición 3.81 y su relación al movimiento libre entre ambos pozos, al adimensionalizar la variable espacial, la fuerza de atrapamiento se puede expresar en términos de \bar{x} y un parámetro η (cuyo significado se clarificará en los siguientes párrafos), de la siguiente manera

$$f_{\text{atrapamiento}}(\bar{x}, \eta) = -\frac{4\Delta E}{L} \frac{\zeta(\eta)}{\sqrt{3}} \bar{x} \left[\frac{\zeta^2(\eta)}{3} \bar{x}^2 - 1 \right] \quad (3.86)$$

donde $\zeta(\eta)$ es una función de η que se definirá posteriormente, no siendo necesaria para el presente análisis. Con la expresión anterior la condición 3.81 se puede expresar como

$$\left| -\frac{4\Delta E}{L} \frac{\zeta(\eta)}{\sqrt{3}} \bar{x} \left[\frac{\zeta^2(\eta)}{3} \bar{x}^2 - 1 \right] \right| < \left| \frac{v_0}{\mu} \right| \quad (3.87)$$

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

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

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

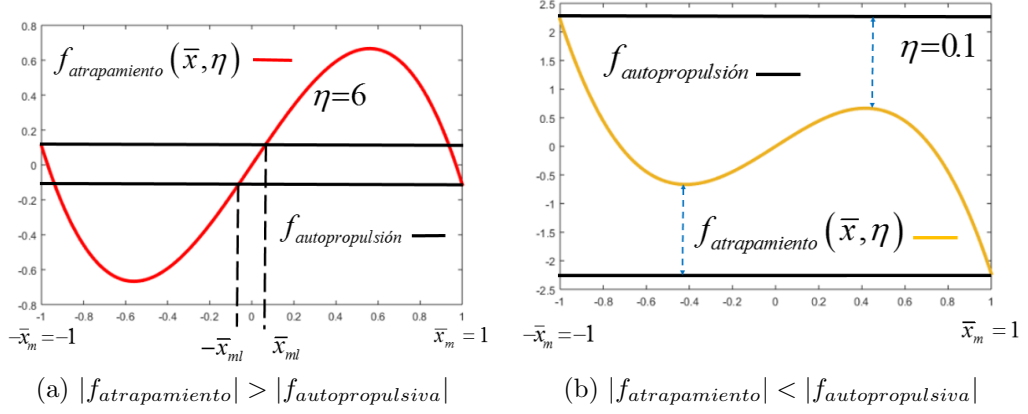


Figura 3.8: Dos tipos de regiones de movimiento dependiendo si la fuerza autopulsiva es menor o mayor a la de atrapamiento.

Para determinar matemáticamente si la fuerza autopulsiva es mayor o no que la de atrapamiento lo importante es conocer los puntos mínimos y máximos en la fuerza de atrapamiento ya que ellos dan cuenta de la magnitud absoluta de dicha fuerza. Estos puntos se encuentran trivialmente derivando $f(\bar{x}, \eta)$, estando los mismos en función del parámetro η

$$\bar{x}_{max,min} = \pm \frac{1}{\zeta(\eta)} \quad (3.88)$$

Si se sustituyen estos puntos en la condición 3.87, referida al movimiento libre entre ambos pozos, se obtiene

$$\sqrt{\frac{4^3}{3^3} \frac{\Delta E}{L} \frac{\mu}{v_0}} \leq 1 \quad (3.89)$$

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

$$\eta \equiv \sqrt{\frac{4^3}{3^3} \frac{\Delta E}{L} \frac{\mu}{v_0}} \quad (3.90)$$

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

$$\eta \leq 1 \quad (3.91)$$

Esta condición nos garantiza que para valores de $\eta \leq 1$ las partículas se desplazarán libremente entre ambos pozos pudiendo superar la barrera de energía entre ambos. Para valores $\eta > 1$ las partículas quedan confinadas a

difundirse en uno u otro pozo. En el caso de la condición matemática 3.80 (equivalente a la expresada en términos físicos), por supuesto, la densidad de probabilidad estará bien definida siempre para estos valores, lo cual se explica si tomamos en cuenta que como se verá a continuación la densidad de probabilidad se normaliza en el dominio $[-1, 1]$. Por otro lado para $\eta > 1$ surgen dos regiones independientes donde se difunden las partículas por lo que en realidad se estaría hablando de dos densidades de probabilidad, una por cada región, requiriendo así una normalización diferente para cada caso.

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

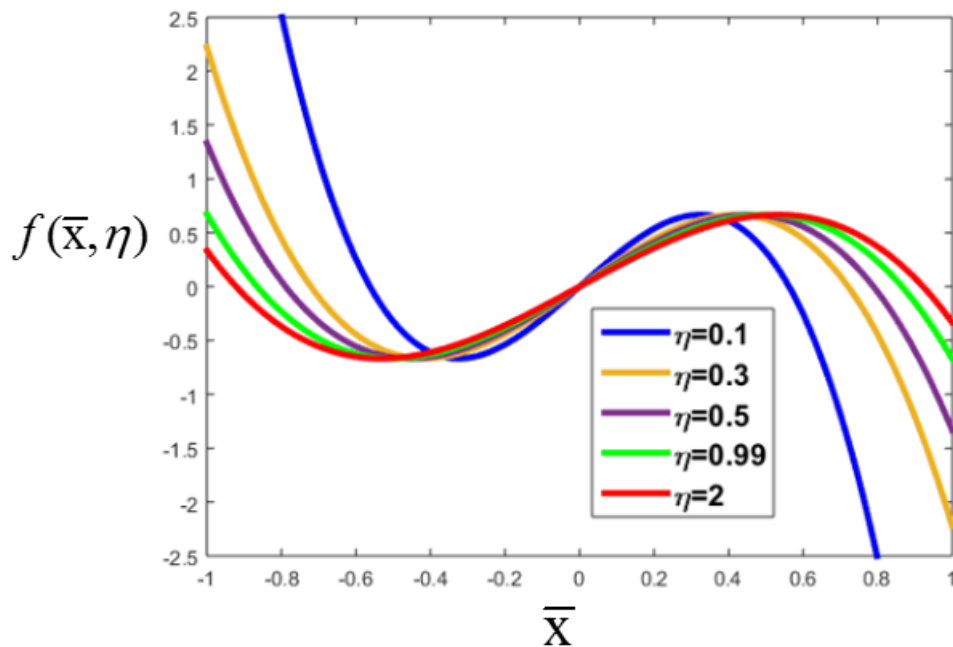


Figura 3.9: Fuerza de atrapamiento en función del parámetro η . Aunque aquí no se muestra explícitamente la fuerza autopropulsiva es claro que para $\eta < 1$ ésta última sería mayor que las fuerzas de atrapamiento. Para $\eta = 2$ esto no se cumple y la fuerza autopropulsiva es menor a la de atrapamiento.

Ahora observemos la expresión 3.90 para dar un significado físico al parámetro adimensional η . Este parámetro nos da cuenta de la forma que adquiere el potencial a través de qué tan pronunciada es la barrera de energía ΔE . Observando con cuidado los términos en éste se puede identificar que el denominador $v_0 L \mu^{-1}$ tiene unidades de energía, interpretándose por tanto como el trabajo que realiza la partícula al viajar la distancia característica

L (ver Figura 3.7). Por tanto η relaciona la barrera de energía que separa ambos pozos con el trabajo mencionado anteriormente.

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

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

$$x_m = \frac{L}{\sqrt{3}} \left[\frac{\eta^{\frac{1}{3}}}{\left(1 + \sqrt{1 - \eta^2}\right)^{\frac{1}{3}}} + \frac{\left(1 + \sqrt{1 - \eta^2}\right)^{\frac{1}{3}}}{\eta^{\frac{1}{3}}} \right] \quad (3.92)$$

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

$$P_{\text{eq}}(\bar{x}) = \frac{\mathcal{N}(0)}{1 - \frac{3^3}{4}\eta^2\bar{x}_m^2\bar{x}^2(\bar{x}_m^2\bar{x}^2 - 1)^2} \exp \left\{ -4\bar{x}_m^2 \frac{\mu\alpha\Delta E}{v_0^2} \int_0^{\bar{x}} d\bar{x}' \frac{\bar{x}'(\bar{x}_m^2\bar{x}'^2 - 1)}{\left[1 - \frac{3^3}{4}\eta^2\bar{x}_m^2\bar{x}'^2(\bar{x}_m^2\bar{x}'^2 - 1)^2\right]} \right\} \quad (3.93)$$

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

$$\chi \equiv \frac{\mu\alpha\Delta E}{v_0^2} \quad (3.94)$$

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

$$\chi = \frac{\text{longitud característica}}{\text{longitud de persistencia}} \quad (3.95)$$

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

$$P_{\text{eq}}(\bar{x}) = \frac{\mathcal{N}(0)}{1 - \frac{9}{4}\eta^2\zeta^2(\eta)\bar{x}^2 \left[\frac{1}{3}\zeta^2(\eta)\bar{x}^2 - 1\right]^2} \exp \left\{ -\frac{4}{3}\chi\zeta^2(\eta) \int_0^{\bar{x}} d\bar{x}' \frac{\bar{x}' \left(\frac{1}{3}\zeta^2(\eta)\bar{x}'^2 - 1\right)}{\left[1 - \frac{9}{4}\eta^2\zeta^2(\eta)\bar{x}'^2 \left[\frac{1}{3}\zeta^2(\eta)\bar{x}'^2 - 1\right]^2\right]} \right\} \quad (3.96)$$

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

$$\zeta(\eta) \equiv \frac{\eta^{\frac{1}{3}}}{\left(1 + \sqrt{1 - \eta^2}\right)^{\frac{1}{3}}} + \frac{\left(1 + \sqrt{1 - \eta^2}\right)^{\frac{1}{3}}}{\eta^{\frac{1}{3}}} \quad (3.97)$$

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

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

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

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

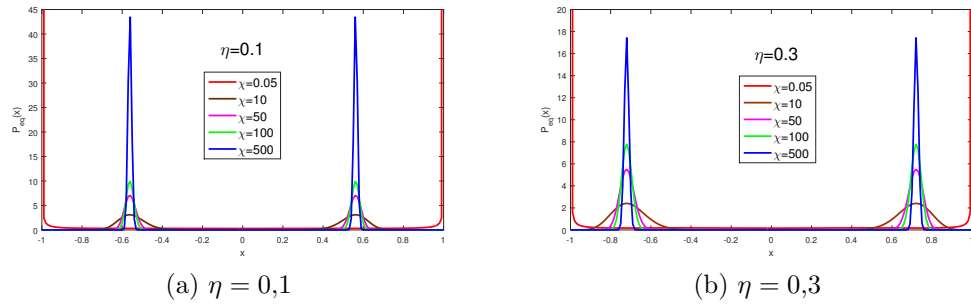


Figura 3.10: Conforme el valor de η aumenta, los mínimos del potencial se desplazan haciéndolo con ellos también las distribuciones de probabilidad.

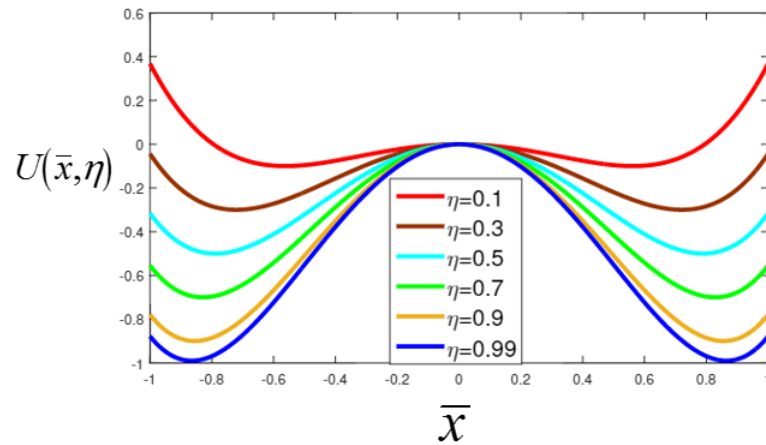


Figura 3.11: Potencial de doble pozo normalizado.

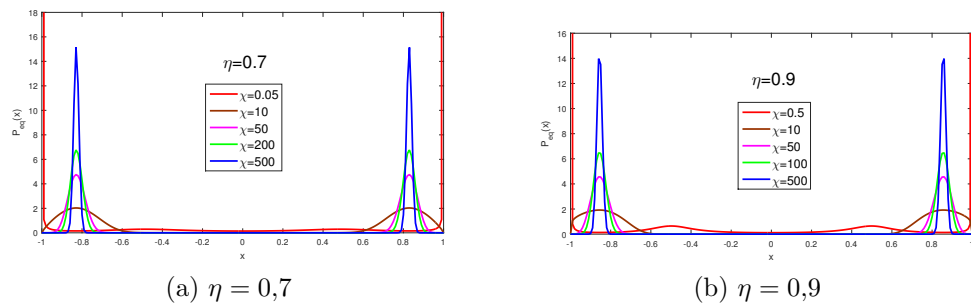


Figura 3.12: Conforme el valor de η aumenta, los mínimos del potencial se desplazan haciéndolo con ellos también las distribuciones de probabilidad.

Para la Figura 3.11, se utilizó la expresión

$$U(\bar{x}, \eta) = \sqrt{\frac{3^3 v_0}{4^3 \mu}} L \eta \left[\frac{1}{9} \zeta^4(\eta) \bar{x}^4 - \frac{2}{3} \zeta^2(\eta) \bar{x}^2 \right] \quad (3.98)$$

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

Ahora bien, con respecto al parámetro χ se pueden observar dos tipos de comportamientos conforme el valor de η aumenta. En la Figura 3.10 el comportamiento no es notoriamente variable conforme varían los valores de χ , sin embargo remitiéndonos a la Figura 3.12, en (b), correspondiente a $\eta = 0,9$ se comienza a percibir un comportamiento distinto para valores de χ pequeños, marcadamente en $\chi = 0,05$. En adición a la acumulación en las paredes, aparece un pico más allá del mínimo de potencial. Para estudiar ambos comportamientos nos referimos a las Figuras 3.13 y 3.14 siendo $\eta = 0,5$ y $\eta = 0,99$ valores característicos para cada uno.

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

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

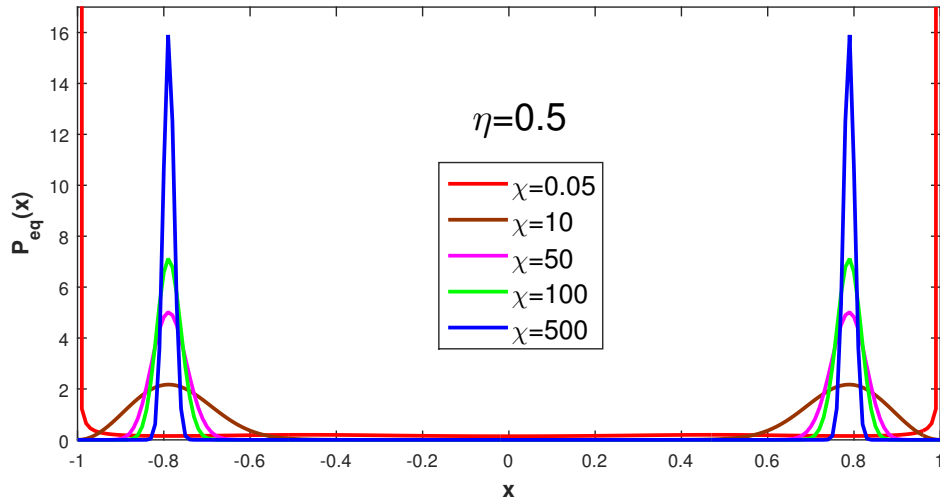


Figura 3.13: Distribuciones de probabilidad de «equilibrio» para $\eta = 0,5$ y valores crecientes de χ .

Ahora se estudia el segundo tipo de comportamiento refiriéndonos a la Figura 3.14. Como se adelantaba previamente, conforme aumenta el valor de η surge un comportamiento distinto, teniéndose acumulación en dos zonas distintas para valores pequeños de χ . Una zona cercana a las paredes del potencial (observada previamente) y otra alejada en sentido contrario a los mínimos de potencial. Recordemos que η debe satisfacer $\eta \leq 1$, por tanto $\eta = 0,99$ se corresponde con un valor cercano al límite permitido para que la partícula se mueva libremente entre ambos pozos del potencial. Con respecto a valores grandes de χ el análisis sería el mismo que para la Figura 3.13,

En este caso el análisis se remite a valores pequeños e.g. $\chi = 0,05$ donde es manifiesto dicho comportamiento. Pues bien, estos valores se relacionan a una longitud de persistencia grande con relación a la longitud característica del sistema. Como se vio anteriormente en este caso es más probable encontrar a las partículas cerca de las paredes confinantes. Ahora bien, buscamos explicar este segundo pico en términos de los efectos combinados de persistencia y la forma del potencial. La consideración «constante» es la que se refiere a la persistencia del sistema volviéndose más marcado este comportamiento conforme aumenta el valor de η , por tanto la explicación gira en torno a este último parámetro. Recordemos que para valores $\eta \leq 1$ las partículas se mueven libremente entre los pozos, sin embargo conforme η tiende a la unidad, esto se vuelve más difícil ya que esto se relaciona con que la fuerza de atrapamiento es cada vez más cercana a la de autopropulsión, lo cual a nivel de la estructura del potencial significa un aumento en la magnitud de

la barrera de energía ΔE como es evidente en la Figura 3.11. Esto explicaría que la probabilidad de encontrar a las partículas poco antes del máximo en la magnitud de la barrera fuera mayor debido a que superarla se vuelve más complicado. Es importante enfatizar que dicho efecto debido a la barrera de energía entre ambos pozos si, siempre está presente, cobrando relevancia conforme la barrera aumenta, esto último caracterizado por un aumento en η siempre y cuando todavía se permite el libre tránsito entre ambos pozos.

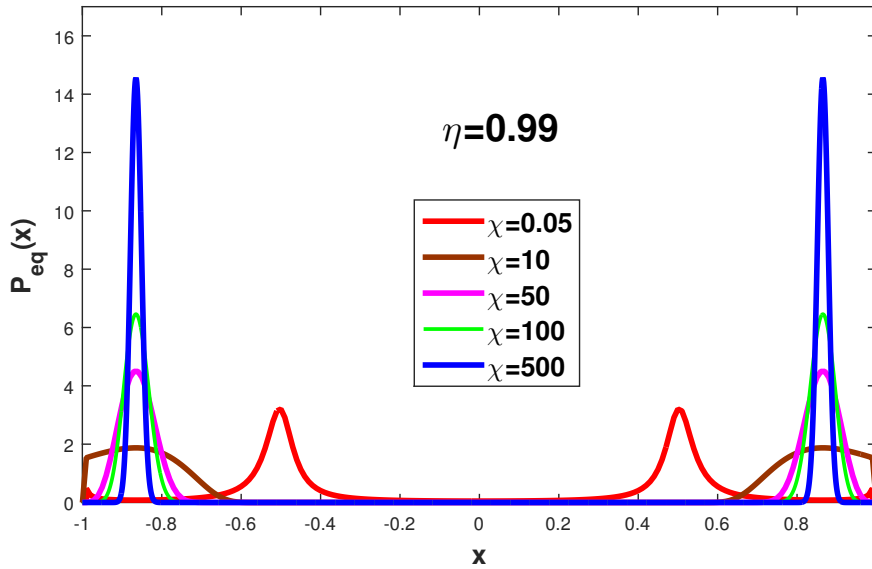


Figura 3.14: Distribuciones de probabilidad de «equilibrio» para $\eta = 0,99$ y valores crecientes de χ .

Caso pasivo: difusión efectiva

Al igual que para el potencial armónico, ahora la difusión efectiva correspondiente en este caso viene dada por

$$\mathcal{D}(x) = \frac{v_0^2}{\alpha} \left[1 - \frac{\mu^2}{v_0^2} \frac{16\Delta E^2}{L^2} \frac{x^2}{L^2} \left(1 - \frac{x^2}{L^2} \right)^2 \right] \quad (3.99)$$

Este término difusivo es por supuesto más complejo que el correspondiente al potencial armónico, saltando a la vista que esta función cuenta con más extremos relativos siendo esto importante para el análisis posterior.

Utilizando esta difusión en 3.40, adimensionalizando x con el valor de los puntos de confinamiento x_m y t con un tiempo asociado a estos $t_m = x_m/v_0$, se

obtiene una expresión finalmente solo en términos de las variables de espacio y tiempo sin dimensiones y los parámetros característicos del sistema η y χ

$$\Delta\bar{x} = \frac{3}{2}\eta\zeta(\eta)\bar{x}\left(1 - \frac{1}{3}\zeta^2(\eta)\bar{x}^2\right)\Delta\bar{t} + \sqrt{[\chi\zeta]^{-1}\frac{9}{4}\eta\left[1 - \frac{9}{4}\eta^2\zeta^2(\eta)\bar{x}^2\left(1 - \frac{1}{3}\zeta^2(\eta)\bar{x}^2\right)^2\right]}\Delta\bar{t}\Psi \quad (3.100)$$

Las distribuciones de probabilidad obtenidas a partir de la solución numérica de esta ecuación se muestran en las Figuras 3.15 y 3.16

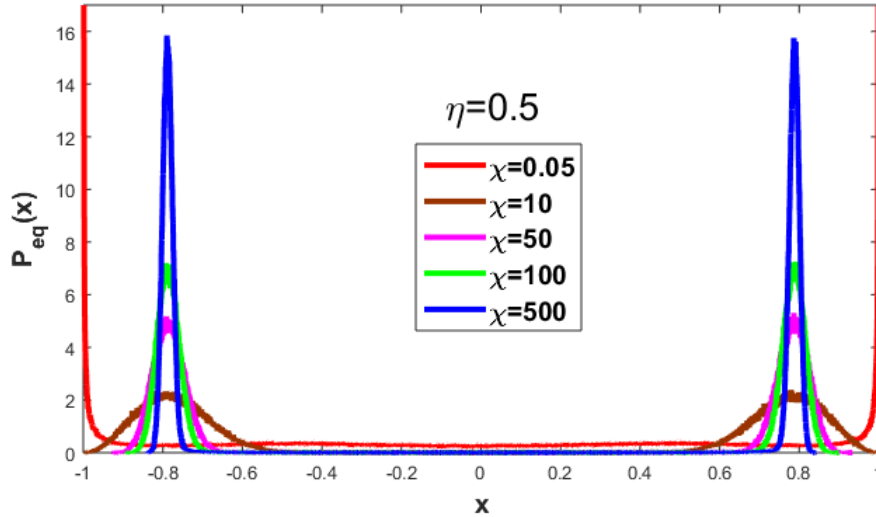


Figura 3.15: Distribuciones de probabilidad obtenidas con $\eta = 0,5$ y valores crecientes de χ para partículas Brownianas pasivas en un medio inhomogéneo no isotérmico.

Al igual que en el potencial armónico, suponiendo un sistema descrito por una movilidad constante μ se asocia un perfil de temperatura efectiva a la difusión efectiva

$$\mathcal{T}(x) = T_0 \left[1 - \frac{\mu^2}{v_0^2} \frac{16\Delta E^2}{L^2} \frac{x^2}{L^2} \left(1 - \frac{x^2}{L^2} \right)^2 \right] \quad (3.101)$$

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

$$T(\bar{x}, \eta) = T_0 \left\{ 1 - \frac{9}{4}\eta^2\zeta^2(\eta)\bar{x}^2 \left[1 - \frac{1}{3}\zeta^2(\eta)\bar{x}^2 \right]^2 \right\} \quad (3.102)$$

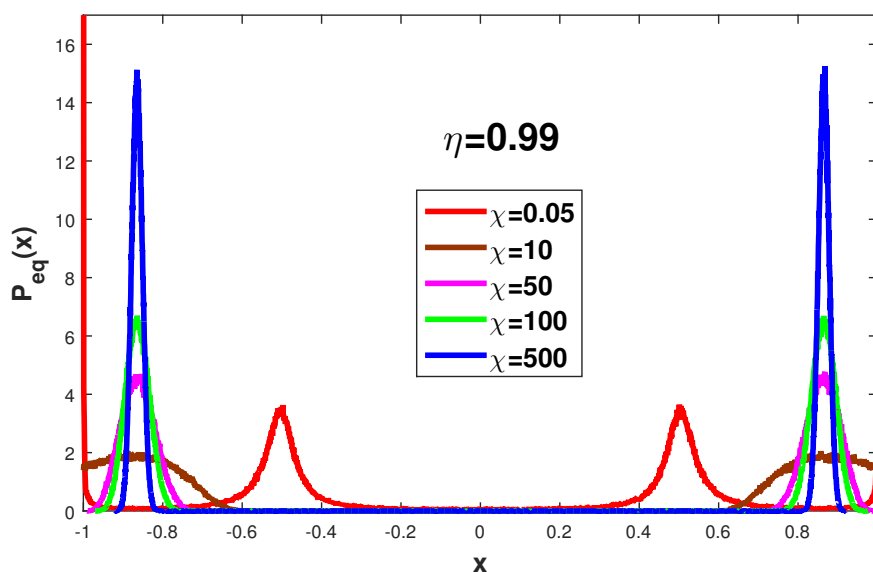


Figura 3.16: Distribuciones de probabilidad obtenidas con $\eta = 0,99$ y valores crecientes de χ para partículas Brownianas pasivas en un medio inhomogéneo no isotérmico.

Este perfil de temperatura efectiva explica mediante la aparición de estos puntos «calientes» y «fríos» la concentración de partículas en ciertas regiones del potencial. En la Figura 3.17 se contrastan el perfil de temperatura efectiva normalizado en función del parámetro η contra las distribuciones de probabilidad sólo para $\chi = 0,05$ conforme η aumenta de manera creciente. En dicha imagen resulta clara la aparición de estas regiones de acumulación cercanas a la barrera de potencial correspondiéndose exactamente con los puntos «fríos» en que se tiene un mínimo en la temperatura efectiva. Así de nuevo, se puede interpretar que las partículas que exhiben persistencia grande son empujadas fuera de las regiones calientes correspondientes a la temperatura efectiva máxima, siendo menos probable encontrarlas ahí.

En esta imagen también resulta claro que este efecto siempre se encuentra presente en el caso de partículas difundiéndose con grandes longitudes de persistencia. En ésta se aprecia aunque de manera poco perceptible estos puntos de acumulación en adición a los de las paredes del sistema. En el caso de la temperatura efectiva el incrementar η resulta en temperaturas efectivas máximas más grandes, las cuales incrementan dicho efecto.

Nuevamente la inhomogeneidad del sistema codificada en la temperatura efectiva resulta relevante para estas distribuciones de probabilidad alejadas de la Gaussianidad características de partículas que exhiben movimiento activo. Esta inhomogeneidad es el ingrediente responsable de la correspondencia

exacta entre el caso pasivo y activo.

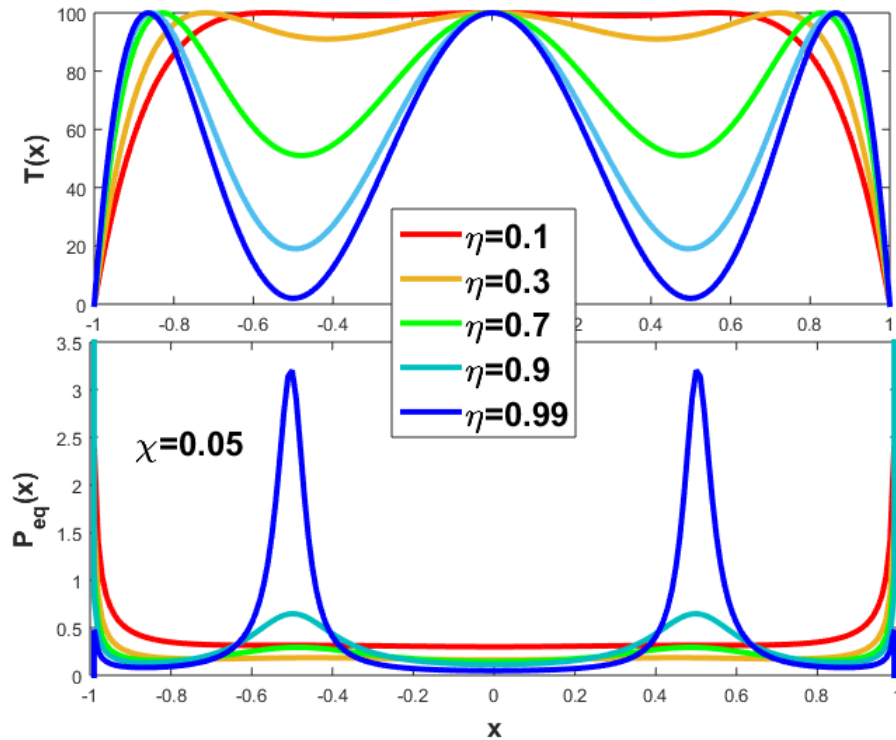


Figura 3.17: Contraste entre el perfil de temperatura efectiva en función del parámetro η y las distribuciones de probabilidad caracterizadas por persistencia grande $\chi = 0,05$ en función también de η creciente.

Caso activo vs caso pasivo

De nuevo, al igual que en el potencial armónico, las distribuciones de probabilidad obtenidas para partículas Brownianas activas exhibiendo patrones de movimiento RT (suponiendo $J_{st} = 0$) y aquellas para partículas Brownianas pasivas difundiéndose en un medio no isotérmico son exactamente iguales como se puede observar en las Figuras 3.18 y 3.19.

Si bien en el caso activo se recurrió a los parámetros característicos η y χ para explicar las distribuciones obtenidas, dichos parámetros en última instancia están asociados a las cantidades efectivas de difusión y temperatura, es decir, esta inhomogeneidad está presente de sí en el desarrollo para las partículas «run-and-tumble». Por otro lado, dichas cantidades al utilizarse en el caso de movimiento Browniano pasivo le confieren este comportamiento precisamente a través de la inhomogeneidad expresada en términos de

propiedades características de movimiento activo como son la velocidad de autopropulsión y la persistencia.

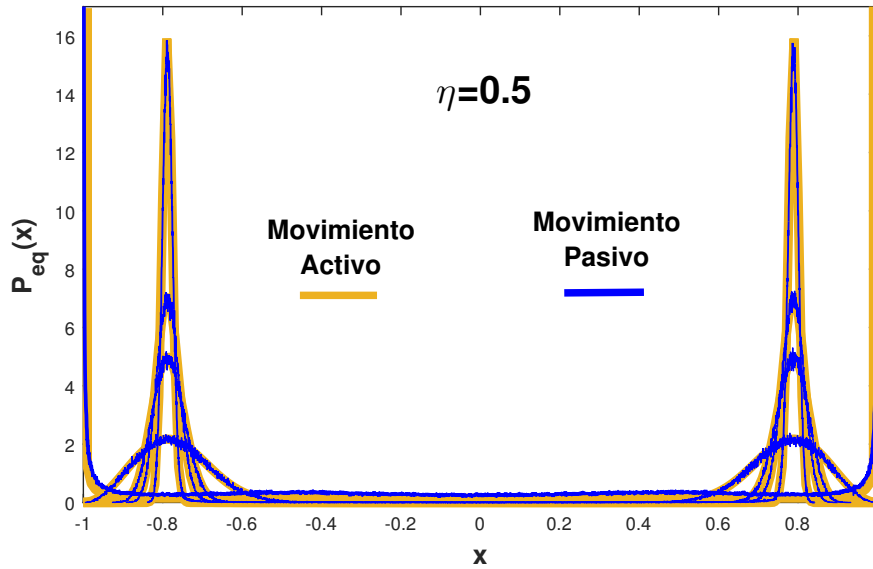


Figura 3.18: Comparación de las distribuciones de probabilidad obtenidas para partículas activas que exhiben patrones de movimiento RT (se supone estacionariedad y $J_{st} = 0$) y aquellas para partículas pasivas moviéndose en un medio con temperatura inhomogénea.

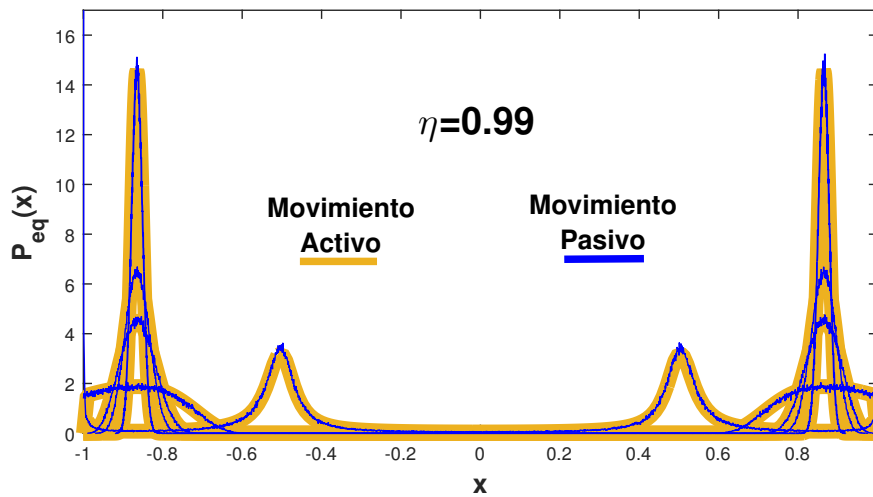


Figura 3.19: Comparación de las distribuciones de probabilidad obtenidas para partículas activas que exhiben patrones de movimiento RT (se supone estacionariedad y $J_{st} = 0$) y aquellas para partículas pasivas moviéndose en un medio con temperatura inhomogénea.

3.6. Distribuciones no-Boltzmann-Gibbs: inhomogeneidad

Como se constató en las distribuciones (soluciones) de equilibrio ($J_{st} = 0$) para partículas activas que exhiben dinámica «run-and-tumble», éstas no se corresponden con aquellas que describen desde el punto de vista estadístico sistemas en equilibrio termodinámico (Boltzmann-Gibbs). Retomemos estas soluciones dadas por la expresión

$$P_{\text{eq}}(x) = \frac{\mathcal{N}(0)}{\mathcal{D}(x)} \exp \left\{ \int_0^x dx' \frac{\mathcal{V}_{\text{drift}}(x')}{\mathcal{D}(x')} \right\} \quad (3.103)$$

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

Ahora, existen situaciones en las que si los parámetros que describen el movimiento activo satisfacen ciertas condiciones tales como que el término de difusión que da cuenta del acoplamiento entre el movimiento de la partícula y el entorno, sea independiente de la posición de la partícula, es decir, $\mathcal{D}(x) = D$, entonces la expresión 3.103 se puede escribir en la forma de la distribución de Boltzmann-Gibbs

$$P_{\text{B-G}} = \frac{1}{Z(D)} \exp \left[-\frac{G(x)}{D} \right] \quad (3.104)$$

donde

$$Z(D) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \exp \left[-\frac{G(x')}{D} \right] \quad (3.105)$$

siendo $G(x)$ una función arbitraria de la posición. Así, en este caso se puede identificar un parámetro global homogéneo que puede ser relacionado con una cantidad termodinámica efectiva, a saber una temperatura efectiva T_0 .

En este sentido se puede afirmar que existen situaciones en las cuales emergen distribuciones Boltzmann-Gibbs a partir de sus contrapartes fuera de equilibrio (ec. 3.103). Ejemplo de ello es el llamado límite difusivo, en el cual, tomando los límites, $v \rightarrow \infty$ y $\alpha \rightarrow \infty$, se puede considerar el término

$D_{\text{free}} = \frac{v_0^2}{\alpha}$ constante surgiendo con ello una distribución del tipo Boltzmann-Gibbs.

¿Por qué este límite está relacionado a estados de equilibrio? Esto se puede explicar en términos de las fluctuaciones del sistema. Si la longitud que caracteriza dichas fluctuaciones es más pequeña que cualquier otra longitud del sistema, e.g. longitud de persistencia, se satisface la relación de Fluctuación-Disipación. Que ésta última se satisfaga asegura que el sistema se encuentra en estados de equilibrio con una temperatura efectiva homogénea asociada a través de dicha relación. Por supuesto en este caso las partículas tienden a acumularse alrededor de puntos estables del sistema los cuales suelen ser los mínimos globales del potencial.

En el otro extremo llamado régimen de persistencia se encuentran las distribuciones no-Boltzmann-Gibbs (ec. 3.103), en las cuales no se puede identificar un parámetro global homogéneo, llevando con ello al sistema a una situación fuera de equilibrio.

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

$$v_{R,L}(x) = v_0 \mp \mu U'(x) \quad (3.106)$$

Por tanto, es esta inhomogeneidad espacial conferida al movimiento de la partícula lo que causa la dependencia espacial en el término que hemos identificado con una difusión efectiva. Así, es precisamente este «ingrediente» de inhomogeneidad el que da cuenta de la Física fuera de equilibrio en sistemas activos a partir de sus propiedades de movimiento.

Lo anterior queda de manifiesto cuando el hecho de utilizar el término de difusión efectiva dependiente del espacio en la solución estacionaria correspondiente a partículas Brownianas pasivas, éstas adquieren el mismo comportamiento difusivo que sus contrapartes activas. Nótese que establecer dicha conexión se traduce en reconocer que la expresión 3.28, correspondiente a la solución estacionaria de partículas activas que exhiben patrones de movimiento «run-and-tumble», se corresponde de manera formal con la solución para una partícula Browniana pasiva que bajo la influencia de un potencial externo $U(x)$ se difunde con movilidad constante μ en un medio al cual se confiere inhomogeneidad a través del término de difusión/temperatura efectiva inhomogénea (ec. 2.137).

Ahora bien, es evidente que al utilizar ya sea la difusión efectiva o temperatura efectiva dependiente del espacio en los análisis anteriores, supone

que éstas se encuentran relacionadas de alguna manera. En este sentido es que se hacen la identificaciones

$$\mathcal{T}(x) = \frac{\mathcal{D}(x)}{\mu k_B} \quad (3.107)$$

$$U'(x) = -\frac{\mathcal{V}_{drift}(x)}{\mu} \quad (3.108)$$

El efecto de perfiles de temperatura se ha estudiado en trabajos anteriores demostrándose su impacto en la estabilidad relativa del movimiento difusivo de partículas Brownianas, v.g. el movimiento en un potencial biestable con una capa caliente [38] [21]. Sin embargo en nuestro caso esta identificación relaciona más bien una difusión y temperatura que dan cuenta de las propiedades estocásticas del sistema. Y es precisamente esta suerte de temperatura efectiva «estocástica» la que se ha asociado intuitivamente con la emulación del movimiento activo en partículas Brownianas pasivas como se adelantó en la sección 3.3 y en los análisis hechos anteriormente para los casos pasivos.

En este sentido, es fácil notar que $\mathcal{T}(x)$ toma un valor máximo en los mínimos del potencial de energía, mientras que se vuelve nula en las posiciones que corresponden a los puntos x_m . Pues bien, el hecho de que el medio sea «más caliente» en los mínimos de potencial produce un efecto sobre las partículas tal que las impulsa fuera de las posiciones estables (mínimos del potencial) hacia las fronteras cambiando en el camino los puntos de estabilidad por aquellos en las fronteras, a saber x_m . Esto explicaría desde otro punto de vista la acumulación de las partículas que exhiben marcadas propiedades de persistencia (propias del movimiento activo) en las fronteras o paredes del sistema.

Ahora bien, qué se encuentra detrás de suponer la validez de la expresión 3.107, requiere de un análisis más profundo sin embargo en la siguiente sección se da un argumento plausible detrás de esta suposición.

3.7. Difusión y temperatura efectiva

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

$$\mathcal{T}(x) = \frac{\mathcal{D}(x)}{\mu k_B} \quad (3.109)$$

análoga a la relación de fluctuación-disipación local con la diferencia que en este caso la movilidad μ en el medio es uniforme. La relación fluctuación-disipación local para el caso de movimiento en el régimen sobrearmortiguado

(utilizado en el caso pasivo) está dada por [21]

$$D(x) = \frac{k_B T(x)}{\gamma(x)} = \mu(x) k_B T(x) \quad (3.110)$$

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

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

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

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

Con referencia a lo anterior se plante un ejemplo más intuitivo. Una partícula autopropulsada, a saber, una bacteria, en principio sujeta a las propiedades variables del medio podría mantener la misma velocidad de autopropulsión v_0 a través de por ejemplo la autorregulación de su metabolismo (proceso interno) acelerando o desacelerando el mismo en función de la energía requerida para mantener dicha velocidad. Así, en principio existe un

complejo mecanismo de interconversión de energía a través de las fronteras entre la partícula y el medio en adición al proceso metabólico interno, que mantiene a la bacteria aproximadamente con velocidad constante. Sin embargo, un observador externo sólo vería que la bacteria se mueve a cierta velocidad aparentemente constante (consecuencia del proceso interno), pudiendo inferir a partir del desconocimiento de los mecanismos mencionados anteriormente, que la bacteria siente la misma fricción por parte del medio (γ uniforme) reflejado en la velocidad constante de la misma. La relación fluctuación-disipación local daría cuenta del mecanismo exacto de acoplamiento entre la partícula y el medio, mientras que la identificación hecha nos da cuenta precisamente de este acoplamiento a partir de las consecuencias de la dinámica estocástica del mismo.

Estas consecuencias dinámicas propias del movimiento activo se encuentran en la definición misma de la difusión y temperatura efectiva recordando la definición general encontrada para partículas «run-and-tumble»

$$\mathcal{D}(x) = \frac{v_R(x) v_L(x)}{\alpha(x)} \quad (3.111)$$

Ahora bien, por supuesto la difusión/temperatura efectiva deben estar relacionadas a una difusión y temperatura en el sentido usual de éstas. Por el momento dicha cuestión se deja para un análisis más detallado en trabajos posteriores. Dicha relación estaría relacionada a la comprensión de los mecanismos exactos de acoplamiento entre la partícula y el medio.

En el caso de movimiento Browniano pasivo, se ha incorporado inhomogeneidad al medio a través de la temperatura efectiva $\mathcal{T}(x)$ lo cual tuvo como resultado que el comportamiento difusivo fuera el mismo observado para el caso activo. Como se mencionó anteriormente esta temperatura efectiva se encuentra relacionada a un perfil inhomogéneo de temperatura termodinámica, cuyo efecto en la estabilidad de sistemas Brownianos pasivos ha sido bien documentado teórica y experimentalmente [21] [38]. De este modo no es de extrañar el efecto de esta temperatura efectiva en el comportamiento difusivo del sistema.

Capítulo 4

Conclusiones

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

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

Por otro lado en lo que concierne al movimiento pasivo lo que se estudió fue un sistema en el que partículas Brownianas pasivas se difunden con movilidad constante μ en un medio inhomogéneo no isotérmico caracterizado por un perfil de temperatura efectiva $\mathcal{T}(x)$, bajo la influencia, al igual que en el caso activo, de un potencial externo $U(x)$. El punto de conexión se establece a partir de la solución estacionaria que en ambos casos resulta ser equivalente, siendo la difusión/temperatura efectiva la cantidad clave que une ambos comportamientos.

La primera conclusión que resulta evidente al observar las Figuras 3.6

para el potencial armónico y 3.18-3.19 para el potencial de doble pozo, es que las soluciones (distribuciones) en ambos casos se corresponden exactamente no pudiéndose distinguir en última instancia si se trata del sistema activo o el pasivo. ¿Por qué sucede esto? La respuesta subyace en lo que sería otra conclusión, si no es que la más importante, aquella en relación a los términos que conectan ambos casos, a saber, la difusión/temperatura efectiva.

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

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

la cual escrita de manera explícita de acuerdo a las expresiones asumidas para las velocidades y la tasa de cambio de dirección, es

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

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

Ahora bien, este término difusivo aparece en las soluciones (distribuciones) de equilibrio para el caso activo:

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

y, como se discutió en la sección 3.6, son precisamente este tipo de distribuciones no-Boltzmann-Gibbs las que describen al sistema activo como un sistema fuera de equilibrio. Asimismo se concluyó que la naturaleza intrínseca de estas distribuciones reside en que no se puede identificar un parámetro global homogéneo, siendo éste la difusión o en su caso para un sistema que cumple Fluctuación-Disipación, una temperatura efectiva asociada. Por tanto es este término difusivo que al depender de la posición no permite se pueda identificar dicho parámetro uniforme, siendo en última instancia esta difusión efectiva la que codifica la física fuera de equilibrio en este tipo de sistemas activos a partir de sus propiedades de movimiento.

Físicamente que dependa de la posición se relaciona al confinamiento, siendo el potencial dependiente de la posición el que afecta la velocidad de autopropulsión de la partícula. Así, la incorporación de esta inhomogeneidad a su movimiento lleva al sistema a una situación fuera de equilibrio. En conclusión, sin necesidad de conocer los mecanismos internos locales de conversión de energía, se pudo dar cuenta de la física fuera de equilibrio desde un punto de vista, digamos «externo», en el sentido de considerar el movimiento activo como una consecuencia de los procesos internos.

Esta afirmación se clarifica en el contexto del sistema Browniano pasivo. El impacto que tiene un perfil de temperatura en la estabilidad relativa de este tipo de sistemas es un hecho bien conocido. Por tanto, el utilizar la difusión/temperatura efectiva dependiente de la posición en las ecuaciones que describen un sistema estacionario Browniano pasivo, ya sea desde el enfoque Langevin o el enfoque Fokker-Planck, produce distribuciones no Gaussianas alejadas de equilibrio características de dichos sistemas. Así, en este sentido se puede concluir que la «receta» para que un sistema pasivo emule el comportamiento difusivo de uno activo (en el límite estacionario) es añadir «inhomogeneidad» al sistema pasivo, encontrándose ésta implícita en el término de difusión/temperatura efectiva.

A lo largo del desarrollo del trabajo se utilizó el término «difusión/temperatura efectiva», estando implícito detrás del mismo que éstas cantidades se encuentran relacionadas. El análisis alrededor de la suposición que relaciona ambas cantidades a través de una suerte de relación fluctuación-disipación se hizo con detalle en la sección 3.7. En torno a esto se puede afirmar que dicha justificación parece plausible pero requiere una revisión más profunda, sobre todo en lo referente a la conexión con el mecanismo exacto que dé cuenta de la relación fluctuación-disipación local rigurosa, relacionando con ello el perfil de temperatura efectiva «estocástica» propuesta a un perfil de temperatura local en el sistema.

Yendo más allá en la posible relación con un perfil de temperatura, al tener dicha expresión entonces se podría diseñar un experimento en el cual se observara realmente cómo partículas Brownianas en contacto con el mismo emularían los perfiles de distribución observados en partículas activas. El potencial de confinamiento plausiblemente se podría generar a través de un sistema de trampas ópticas [39].

Por otro lado la conexión entre ambos casos provee una herramienta de análisis simple para este tipo particular de sistemas activos. Como se vió sobre todo en el caso del potencial de doble pozo, la solución exacta de las integrales involucradas en la distribución de probabilidad así como su posterior normalización no son posibles, si no a través de la solución numérica aproximada de éstas. Por tanto, al constatarse que el comportamiento difusi-

vo es exactamente el mismo en ambos casos, resulta más fácil estudiar dichos sistemas activos a partir de las bien conocidas herramientas matemáticas utilizadas para sistemas pasivos, a saber, la simulación numérica de la ecuación de Langevin, donde se puede incluir un término de difusión tan extenso y complicado como se quiera, resultado de un potencial igualmente complejo.

Apéndice A

Solución numérica ec. de Langevin

A.1. Código en Matlab

```
1 close all
2 clear all
3 nruns=1000000
4 ti=0;
5 ton=1;
6 a=[1/0.65,1/0.8];
7 la=length(a);
8 g=gpuDevice(1);
9 reset(g)
10 hfigure;
11 nombre='activeharmonic_1_mo';
12 for j=1:la;
13     aj= a(j);
14     dt=1/1000.*aj;
15     ntimes=2*round((ton-ti)/dt);
16     t0=zeros(1,nruns);
17     x0=zeros(1,nruns);
18     tg=gpuArray(t0);
19     xg=gpuArray(x0);
20     tic
21     Nh=1000;
22     for ll=1:ntimes;
23         disp(num2str(aj) ':' num2str(j) ':')
24         [tg,xg]=arrayfun
25         xh=gather(xg);
26         indp=find(xn>1);
27         xg(indp)=1;
28         indn=find(xn<-1);
```

```

29     xg(indn)=-1;
30     xn=gather(xg);
31     [nelementsx, centersx]=hist(xn,Nh);
32     rho=nelementsx
33     maxprob(j, ll)=rho(round(Nh/2));
34     end
35
36     figure (1)
37     plot(centersx, rho, '-', 'color', rand(1,3));hold on;
38     drawnow
39
40     toc
41     saveas(h, [nombre '_a' num2str(aj) '_b' num2str(bj) '.fig'])
42     save([nombre '_a' num2str(aj) '_b' num2str(bj) '.mat'], 'rho',
         , 'centersx', 'maxprob', 'xn');
43 end

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

```

Bibliografía

- [1] I. Buttinoni, G. Volpe F. Kümmel G. Volpe and Clemens Bechinger. Active brownian motion tunable by light. *J. Phys. Condens. Matter*, 24(284129), 2012.
- [2] W. T. Coffey J. T. Waldron, Yu. P. Kalmykov. *The Langevin Equation*, volume 14. Word Scientific Series.
- [3] F. Schweitzer. *Brownian agents and active particles*. Springer, 2003.
- [4] H. C. Berg. *E. Coli in Motion*. Springer-Verlag New York, Inc., 2004.
- [5] M. T. Mardigan. *Brock: Biology of the microorganisms*. Pearson, 2015.
- [6] R. Golestanian T. R. Liverpool, A. Ajdari. Propulsion of a Molecular Machine by Asymmetric Distribution of Reaction Products. *Phys. Rev. Letters*, 94(220801):1–4.
- [7] Étienne Fodor, Cesare Nardini, Michael E Cates, Julien Tailleur, Paolo Visco, and Frédéric Van Wijland. How Far from Equilibrium Is Active Matter ? 117(038103):1–6, 2016.
- [8] R. Brown. A brief account of microscopical observations... on the particles contained in the pollen of plants; and on the general existence of active molecules in organic and inorganic bodies. *Edinburg New Philosophical Journal*, pages 358–371, 1828.
- [9] C. Wiener. *Poggendorffs Annalen*, 118:79, 1863.
- [10] M. Gouy. Note sur le mouvement brownien. *Journal de Physique Théorique et Appliquée*, 7(1):561–564, 1888.
- [11] A. Einstein. Über die von der molekularkinetischen theorie der wärme geforderte bewegung von in ruhenden flüssigkeiten suspendierten teilchen. *Annalen der Physik*, 322(8):549–560, 1905.

- [12] M. von Smoluchowski. Zur kinetischen Theorie der Brownschen Molekularbewegung und der Suspensionen. *Annalen der Physik*, 326(14):756–780, 1906.
- [13] J. Perrin. *Brownian Movement and Molecular Reality*. Dover Publications, 1995.
- [14] P. Langevin. Sur la théorie du mouvement brownien. *Comptes Rendus Hebdomadaires des Séances de L'Académie des Sciences*, 146:530, 1908.
- [15] E. Nelson. *Dynamical Theories of Brownian Motion*, volume 131. Princeton University Press, 1967.
- [16] B. B. Mandelbrot. *The Fractal Geometry Of Nature*. W. H. Freeman, New York, 1983.
- [17] R. Kubo N. Hashitsume, M. Toda. *Statistical Physics II: Nonequilibrium Statistical Mechanics*. 1991.
- [18] Kubo. The fluctuation-dissipation theorem. *Reports on Progress in Physics*, 29(1):306, 1966.
- [19] Ilya Prigogine and Dilip Kondepui. *Modern Thermodynamics*. 1998.
- [20] Ilya Prigogine. Le domaine de validité de la thermodynamique des phénomènes irréversibles. *Physica*, 15(1-2):272–284, 1949.
- [21] N.G. van Kampen. Relative stability in nonuniform temperature. *IBM Journal of Research and Development*, 32(1):107–111, 1988.
- [22] N.G. van Kampen. *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*. Elsevier, 2007.
- [23] Xavier Durang, Chulan Kwon, and Hyunggyu Park. Overdamped limit and inverse-friction expansion for Brownian motion in an inhomogeneous medium. 062118:1–6, 2015.
- [24] M. Matsuo and S.-i. Sasa. Stochastic Energetics of Non-uniform Temperature Systems. *Physica*, A 276:188, 2000.
- [25] K Sekimoto. Temporal coarse graining for systems of brownian particles with non-constant temperature. *J. Phys. Soc. Japan*, 68:1448, 1999.
- [26] U. Erdmann, W. Ebeling, and F Schweitzer. Brownian particles far from equilibrium. *Eur. Phys. J.*, B 15:105–113, 2000.

- [27] M. Schienbein and H. Gruler. Langevin equation, fokker-planck equation and cell migration. *Bull. Math. Biol.*, 55(3):585, 1993.
- [28] Frank Schweitzer, Werner Ebeling, and Benno Tilch. Complex Motion of Brownian Particles with Energy Depots. 80(23):5044–5047, 1998.
- [29] R. Fürth. Die Brownsche Bewegung bei Berücksichtigung einer Persistenz der Bewegungsrichtung. Mit Anwendungen auf die Bewegung lebender Infusorien. *Zeitschrift für Physik*, 2(3):244–256, 1920.
- [30] G. I. Taylor. Diffusion by continuous movements. *Proceedings of the London Mathematical Society*, s2-20(1):196–212, 1921.
- [31] S. Goldstein. On diffusion by discontinuous movements, and on the telegraph equation. *Q. J. Appl. Math.*, 4(2):139, 1951.
- [32] J. Masoliver and G. H. Weiss. Telegrapher’s equations with variable propagation speeds. *Physical Review E*, 49(5):48, 1994.
- [33] M. J. Schnitzer. Theory of continuum random walks and application to chemotaxis. *Physical Review E*, 48(4):2553, 1993.
- [34] C. Gardiner. *Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry, and the Natural Sciences*. Springer-Verlag, 2004.
- [35] J. Tailleur and M. E. Cates. Statistical Mechanics of Interacting Run-and-Tumble Bacteria. *Phys. Rev. Lett.*, 100(218103):3, 2008.
- [36] J. Tailleur and M. E. Cates. Sedimentation, trapping, and rectification of dilute bacteria. *Europhysics Letters*, 86(60002), 2009.
- [37] J. Palacci, C. Cottin-Bizanne C. Ybert L. Bocquet. Sedimentation and effective temperature of active colloidal suspensions. *Phys. Rev. Lett.*, 105(088304):1, 2010.
- [38] Rolf Landauer. Inadequacy of entropy and entropy derivatives in characterizing the steady state. *Phis. Rev. A*, 12(2), 1975.
- [39] E. Roldán. *Irreversibility and dissipation in microscopic systems*. Springer Theses, 2014.