



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

Movimiento activo helicoidal: una descripción
de matrices aleatorias

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

Físico

PRESENTA:

Sebastián Alvarado Pérez

TUTOR

Francisco Javier Sevilla Pérez



Ciudad de México

2021



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:
A mis padres, con eterno cariño
A mis hermanos, por la felicidad compartida
A mis amigos, por el apoyo en cada una de mis decisiones*

*"El interés del creador es conquistar la naturaleza. El interés del parásito es
conquistar a los hombres."
AYN RAND*

Agradecimientos

Investigación realizada gracias al Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) de la UNAM IN110120. Agradezco a la DGAPA-UNAM la beca recibida”

A mi asesor el Dr. Francisco J. Sevilla por su tiempo, su apoyo y su conocimiento compartido para hacer posible esta tesis.

A mi profesor el Dr. Luis Benet Fernández por sus consejos y pasión por su trabajo que me inspiró a desarrollar este trabajo.

Al Dr. Luis Fernando Magaña Solís por sus palabras, consejos que me permitieron seguir adelante en la carrera y recordarme que mi vida no es parte de la física.

A mi novia Zaira Itzel por su amor puro, apoyo incondicional, su comprensión, sus palabras de aliento y su indescriptible personalidad que me ayuda a seguir cumpliendo mis metas y objetivos día a día.

A mis amigos y colegas: Isabel Y. Rojas Martinez, Efrain Ossmar Díaz Pérez, Xochitl Mariana Rodríguez Aguirre, Jesica Leticia González Robles, Brandon Alejandro Reyes Ferrer, José de Jesús Falcón Vázquez, Rubén Sánchez Duque, Brandon Saúl Gómez Bravo, Rodrigo Rolando Brigido Rivera, Luis Antonio Guerrero Ibarra, Sergio Antonio Murillo Hernández, Carlos David Jiménez Flores, Michelle Gua-

dalupe Torres Rodríguez, Elmer Enrique Tovar Acosta, Andrés Gustavo Angeles Sánchez, Alejandro Paloalto Landon, Alfredo Zinzu Martínez, Valeria Montesinos Chica, Francisco Javier Amezcua González, Johan Martínez Loria, por todas las risas compartidas, apoyo incondicional y la forma que me dieron animos en mis peores y mejores momentos. No pude encontrar mejores amigos en ésta licenciatura.

A mis amigos de toda la vida: Julio Miguel Angel Enríquez Castillo, Ian Carlos Sánchez Mendoza, Giovanni Enrico Ruiz Ortiz, Guadalupe Rosybel Liévanos Nolasco, Miguel Galvan Compañet, Víctor Iván López Estrada, Andrea Madariaga Ulloa, Vania Araceli Silva Bermúdez, Ana Lucía Serna García, por las vivencias compartidas, por las pláticas de temas ajenos a mi trabajo, por los interminables juegos cuyas emociones hicieron posible ser la persona que soy ahora y recordarme que mi pasión, la física, es parte de mi vida. Tenerlos presentes en mi vida fue una gran inspiración para este y futuros trabajos.

Resumen

Uno de los temas de interés de la Física Estadística de sistemas alejados del equilibrio corresponde al movimiento de partículas activas o autopropulsadas. Estas partículas se hallan intrínsecamente en situaciones alejadas del equilibrio y son capaces de absorber energía de su medio ambiente para usarla en su beneficio disipándola para trasladarse. Los procesos físicos y químicos que dan origen al movimiento activo son muy complejos, sin embargo, su descripción puede simplificarse a escalas de tiempo intermedias suficientemente grandes, en comparación de las escalas de tiempo involucradas en los procesos microscópicos de dichos organismos para trasladarse. Por ejemplo, el espermatozoide cuyo tiempo en el que su flagelo da una vuelta completa es del orden de 0.01 s [1] y el tiempo que transcurre para trasladarse una longitud equivalente a la longitud de su propia cabeza es de 0.086 s [2, 3]. Otros ejemplos de materia activa son los ciliados, los mastigóforos, las células germinales, las larvas invertebradas, los rotíferos, entre otros. En general son organismos cuya longitud es menor a 0.5 mm y viven en un medio acuoso [4].

En esta tesis se estudiará el movimiento activo helicoidal en tres dimensiones desde la perspectiva de las ecuaciones de Frenet-Serret en su forma matricial determinadas por la curvatura y la torsión. Estas últimas variables son obtenidas de procesos estocásticos de Ornstein-Uhlenbeck que describen la evolución de la triada de vectores ortonormales tangente, normal y binormal. Usando el vector tangente se puede trazar numéricamente la trayectoria de una partícula activa. Finalmente con ayuda de la teoría de matrices aleatorias y los números cuaternionicos se analizarán los eigenvectores y eigenvalores para diseñar un método, o un algoritmo, para construir de manera alternativa matrices con las características que describen las ecuaciones de Frenet-Serret y así lograr simular trayectorias con mayor eficiencia

computacional. Esto sugiere una conexión entre las matrices aleatorias de rotación y el movimiento helicoidal activo.

La estructura de esta tesis está conformada por cuatro capítulos. Se empieza por una breve introducción en el capítulo 1, donde se mencionan aspectos importantes sobre el movimiento helicoidal, justificando la elección de usar las ecuaciones de Frenet-Serret, que describen cualquier curva en tres dimensiones, y el proceso estocástico de Ornstein-Uhlenbeck para determinar las variables necesarias para usar dichas ecuaciones. Adicionalmente se introduce el tema de las matrices aleatorias y números cuaterniónicos, explicando algunas características y como están relacionadas con el movimiento helicoidal. En el capítulo 2 se desarrollan los aspectos teóricos del proceso de Ornstein-Uhlenbeck, las ecuaciones de Frenet-Serret, y se abordan los temas de las matrices aleatorias y cuaterniones para hacer la conexión entre estos temas más adelante. En el capítulo 3 se construyen las matrices de rotación derivadas de las ecuaciones de Frenet-Serret, se analizan sus propiedades estadísticas a partir de los eigenvalores y eigenvectores, y se propone un método para construir las de manera alternativa utilizando los cuaterniones. Finalmente en el capítulo 4 se describen las conclusiones de los resultados obtenidos como la eficiencia del algoritmo construido, se discuten los resultados del análisis de los eigenvectores asociados al eje de rotación de las matrices que se denotan como eigenejes, al igual que sus eigenfases, es decir los ángulos de rotación asociados y con ello obtener una conexión entre las matrices aleatorias y el movimiento activo helicoidal.

Índice general

Agradecimientos	III
Resumen	V
1. Introducción	1
2. Marco Teórico	4
2.1. Proceso estocástico de Ornstein–Uhlenbeck	4
2.2. Ecuaciones de Frenet-Serret	9
2.3. Matrices Aleatorias	14
2.4. Cuaterniones de Rotaciones	21

3. Análisis de Trayectorias Helicoidales Estocásticas	25
3.1. Las Ecuaciones Estocásticas de Frenet-Serret	25
3.2. Ángulos y ejes de rotación asociados a R_n	31
3.3. Matrices Aleatorias de Frenet-Serret	33
4. Conclusiones	39
A. Cálculo de la expresión $\langle \xi(t)\delta(x - X_t) \rangle_\xi$	42
B. Solución de la ecuación de Fokker-Planck para el proceso de Orns- tein-Uhlenbeck	44
C. Solución de las ecuaciones de Frenet-Serret para hélices	47
D. Eigenfases y eigenejes de las matrices \mathcal{R}_n con curvatura y torsión constantes	49
Bibliografía	51

Introducción

Las propiedades de partículas autopropulsadas han recibido atención en estos últimos años ya que tienen una gran variedad de aplicaciones, desde la medicina para dirigir con eficacia un medicamento, o transportar materia gracias a la manipulación de las propiedades de difusión [5, 6]. Para observar y obtener estas aplicaciones se han estudiado diferentes modelos estocásticos como el movimiento browniano activo o Run-and-Tumble que son caminatas usuales en la naturaleza hechas por organismos. Otro movimiento que pueden exhibir y es usual encontrar en la naturaleza es el helicoidal [4] que a diferencia de los otros dos anteriores se puede estudiar en dos y tres dimensiones.

El movimiento helicoidal está presente en diferentes organismos microscópicos cuya longitud varía entre 5 a 500 μm . Muchos son los factores que dan origen a este movimiento, como en el caso de los Loxodes o Paramecios cuya asimetría corporal no les permiten trasladarse en una línea recta, por lo que tienden a hacer círculos, para compensar esto combinan un movimiento en otro eje para poder trasladarse [7]. Otro tipo de organismos que nadan en medios con un bajo número de Reynolds como el E. Coli o espermatozoides tienen flagelos que rotan, lo que da origen a que puedan auto-propulsarse a lo largo de trayectorias helicoidales [8]. Este tipo de mecanismos son susceptibles a las señales biológicas que reciben de los mismos organismo [1], lo que hace que la trayectoria descrita sea una hélice deformada.

Uno de los experimentos que exhiben trayectorias helicoidales es el de Ting-Wei Su, Liang Xue y Aydogan Ozcan en la referencia [9], donde se observan las diferentes trayectorias encontradas en espermatozoides. En todas se muestran un patrón

de hélices con fluctuaciones o desviaciones que interrumpen los ciclos, es decir las vueltas que dan alrededor del eje helicoidal, sin embargo eventualmente recuperan su dirección preferencial con su movimiento helicoidal. Otro ejemplo más artificial son las esferas Janus en peróxido de hidrógeno. En el artículo donde participa Andrew I. Campbell en [10], se observan trayectorias de estas partículas bajo una fuerza gravitacional, tanto teóricamente como experimentalmente se presenta estas hélices a lo largo del movimiento donde hay irregularidades al principio del mismo y luego se estabilizan.

El movimiento helicoidal se describe como una rotación entorno a un eje de traslación, esta trayectoria que describe una partícula se le puede caracterizar por una curvatura y una torsión, que interpretativamente miden que tan alejada es de una recta la trayectoria y que tan alejado es su movimiento de un plano, respectivamente. Esta torsión y curvatura están determinadas por su velocidad traslacional y su velocidad angular de la partícula en ausencia de fluctuaciones [11]. Sin embargo en la naturaleza están presentes fluctuaciones que podemos modelar con procesos estocásticos, lo que culmina en una caminata helicoidal estocástica.

Las ecuaciones de Frenet-Serret son tres ecuaciones diferenciales acopladas que describen la dinámica de tres vectores ortonormales característicos de cualquier curva, de los cuales se puede obtener la trayectoria de cualquier partícula, pues usa como parámetros la curvatura y la torsión. En particular describen un movimiento helicoidal cuando estos parámetros son constantes. Por otro lado, originalmente el proceso estocástico de Ornstein-Uhlenbeck es un modelo que describe la dinámica aleatoria de la velocidad del movimiento difuso de una partícula, donde existe una fricción de esta con el medio [12]. No obstante se puede usar este proceso para describir características de la trayectoria de algunos organismos, como la curvatura y la torsión. Este proceso tiene las particularidades que su promedio decae exponencialmente en el tiempo, al igual que su varianza y correlación. Esto nos sugiere que usando este proceso para modelar la curvatura y la torsión deberán existir valores característicos de la curvatura y la torsión promedio. Cabe mencionar este proceso incluye el ruido térmico, que al integrarlo obtenemos el proceso de Wiener o mejor conocido como el movimiento browniano. Tanto el proceso de Ornstein-Uhlenbeck, como el proceso de Wiener son gaussianos es decir que la distribución de los posibles valores obtenidos del proceso en cada instante de tiempo es una distribución normal.

Una forma de resolver las ecuaciones de Frenet-Serret es usando su forma discreta [13] que consiste en que la triada de vectores ortonormales está determinada por la multiplicación de matrices cuyas entradas son la curvatura y la torsión, determinadas por los procesos de Ornstein-Uhlenbeck, de modo que se tienen matrices con entradas aleatorias, las cuales pueden ser analizadas desde el punto de vista de la teoría de matrices aleatorias o RMT por sus siglas en inglés. Otro aspecto de estas matrices es que son rotaciones. Por otro lado los números cuaterniónicos unitarios, es decir

números que son una extensión de los números complejos con norma unitaria, están relacionados con las matrices de rotación, de tal modo que se puede sustituir la multiplicación de matrices por la multiplicación de cuaterniones y así obtener de manera más eficiente las trayectorias descritas por las ecuaciones de Frenet-Serret.

La teoría de las matrices aleatorias analiza matrices cuyas entradas son aleatorias con una distribución definida, mediante sus eigenvalores y eigenvectores inducidos por la distribución de sus entradas. Muchos sistemas complejos se modelan con estas matrices, uno de los ejemplos más usuales es modelar núcleos pesados, donde los eigenvalores son energías asociadas a un hamiltoniano aleatorio con propiedades de simetría dadas por el problema. Otra aplicación en el área matemática es que se puede modelar las fluctuaciones de las propiedades de los ceros no reales de la función zeta de Riemann [14].

Como se mencionó en el párrafo anterior, se pueden modelar hamiltonianos en forma de matrices hermitianas aleatorias que podemos dividir en tres conjuntos: los ensambles gaussianos unitarios (GUE), los ensambles gaussianos ortogonales (GOE) y los ensambles gaussianos simpléctico (GSE). Una de las particularidades de estas matrices es que la distribución de sus eigenvalores se puede ver como un semicírculo, que recibe de nombre la distribución de Wigner [15]. Otra característica es que su distribución de espaciamiento de eigenvalores ordenados de mayor a menor, es la distribución de "Wigner surmise". Por último también se puede estudiar la distribución del eigenvalor más grande que esta asociada a la distribución de Tracy-Widom [16]. Estas distribuciones son consecuencia de la construcción de las matrices aleatorias, es decir sus entradas son independientes. Un ejemplo del uso que se le da a la teoría de matrices aleatorias es estudiar las matrices de correlación para series de tiempo de dos sectores de la industria aparentemente independientes, como lo que se hace en el artículo de V. Plerou y colaboradores [17]. Donde se encuentra que el 2% de los eigenvalores más grandes muestra desviaciones de las predicciones de la teoría de matrices aleatorias y se estudian los otros aspectos de las propiedades universales del GOE. Lo que demuestra que los sectores están correlacionados de alguna forma.

Con estas ideas, podemos pensar en los ensambles circulares reales o en sus siglas en inglés CRE, que son matrices aleatorias unitarias con entradas reales, es decir son rotaciones aleatorias, además que es el tipo de operador utilizado para describir el movimiento helicoidal. El objetivo de este trabajo es encontrar una forma de construir un subconjunto de matrices del CRE asociadas a trayectorias helicoidales estocásticas y así encontrar una conexión entre matrices aleatorias y el movimiento activo en tres dimensiones.

Marco Teórico

En primer lugar se presentan brevemente los temas subyacentes para el desarrollo de esta tesis. Primeramente se describirán algunos detalles del proceso de Ornstein–Uhlenbeck que ayudarán a generar los valores de curvatura y torsión necesarios para usar las ecuaciones de Frenet-Serret. También se discutirá en este capítulo las ecuaciones de Frenet-Serret, exhibiendo algunas de sus propiedades y explicando la interpretación geométrica de las mismas. Adicionalmente se introducirán conceptos de las matrices aleatorias así como sus propiedades estadísticas de los eigenvalores. Se usarán estos conceptos más adelante ya que existen matrices asociadas a operadores particulares como lo son las rotaciones que a su vez están relacionadas con los cuaterniones, estos últimos números de cuatro dimensiones serán de gran utilidad para el desarrollo de este trabajo.

2.1. Proceso estocástico de Ornstein–Uhlenbeck

Como se mencionó en la Introducción, el proceso fue propuesto para modelar la velocidad del movimiento difuso de una partícula, además es un proceso markoviano, gaussiano y estacionario. En este trabajo consideraremos este proceso estocástico para modelar la curvatura y la torsión, que son propiedades de las trayectorias en

tres dimensiones, se discutirá en la siguiente sección que solo hace falta conocer estas dos variables para generar la dinámica de partículas u organismos que se mueven de manera helicoidal.

El proceso, o cadena de Markov, se formula en términos de probabilidades condicionales. Dada una sucesión de variables aleatorias X_1, X_2, \dots . Suponemos que la probabilidad que X_{n+1} tome un valor alrededor de x solo depende de la medición anterior $X_n = x_n$. Esta propiedad se puede resumir en la igualdad

$$P(X_{n+1} = x | X_1 = x_1, X_2 = x_2, \dots, X_n = x_n) = P(X_{n+1} = x | X_n = x_n). \quad (2.1.1)$$

Un proceso estocástico X_1, X_2, \dots es gaussiano si la distribución de probabilidad conjunta de sus valores medidos x_1, x_2, \dots es gaussiana. Y un proceso estacionario es un proceso estocástico cuya distribución de probabilidad en tiempos largos tiene una distribución fija.

La ecuación diferencial estocástica que describe el proceso de Ornstein–Uhlenbeck en la forma de Langevin es

$$\frac{dX_t}{dt} = -\gamma(X_t - \mu_0) + \xi(t), \quad (2.1.2)$$

donde $\xi(t)$ es un ruido blanco gaussiano con promedio cero $\langle \xi(t) \rangle = 0$ y covarianza $\langle \xi(t)\xi(s) \rangle = 2\Gamma\delta(t-s)$ con Γ constante (próximamente se va integrar numéricamente para hacer simulaciones).

Podemos dar una solución analítica de X_t , ya que es una ecuación de primer orden lineal no homogénea, dada por

$$X_t = x_0 e^{-\gamma t} + \mu_0(1 - e^{-\gamma t}) + \int_0^t \xi(s) e^{-\gamma(t-s)} ds, \quad (2.1.3)$$

donde x_0 es la condición inicial y μ_0 es el termino promedio donde amortigua el proceso estocástico X_t . Esto último lo podemos justificar si calculamos el promedio $\langle X_t \rangle$ (figura 2.1),

$$\langle X_t \rangle = \left\langle x_0 e^{-\gamma t} + \mu_0(1 - e^{-\gamma t}) + \int_0^t \xi(s) e^{-\gamma(t-s)} ds \right\rangle, \quad (2.1.4)$$

$$\langle X_t \rangle = x_0 e^{-\gamma t} + \mu_0(1 - e^{-\gamma t}) + \int_0^t \langle \xi(s) \rangle e^{-\gamma(t-s)} ds, \quad (2.1.5)$$

$$\langle X_t \rangle = x_0 e^{-\gamma t} + \mu_0(1 - e^{-\gamma t}), \quad (2.1.6)$$

entonces calculando el límite cuando el tiempo tiende a infinito o a tiempos largos obtenemos que el valor promedio está dado por

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle X_t \rangle = \mu_0. \quad (2.1.7)$$

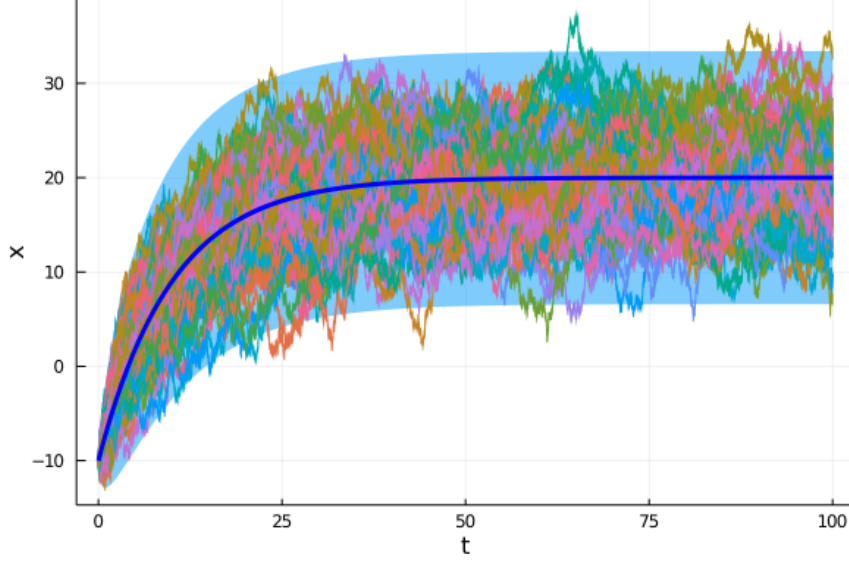


Figura 2.1: Ejemplo de 100 trayectorias del proceso de Ornstein–Uhlenbeck con condición inicial en $x_0 = -10$, constantes $\gamma = 0.1$ y $\Gamma = 2$ y valor de amortiguamiento $\mu_0 = 20$. La sombra azul representa tres veces el error 3σ del promedio que describe la línea azul.

Por otro lado comprobamos que es un proceso cuya correlación decae exponencialmente calculando $\langle X_t, X_s \rangle$ con $s < t$

$$\begin{aligned} \langle X_t, X_s \rangle &= \left\langle (X_s - \langle X_s \rangle)(X_t - \langle X_t \rangle) \right\rangle, \\ \langle X_t, X_s \rangle &= \frac{\Gamma}{\gamma} e^{-\gamma(t-s)}. \end{aligned} \quad (2.1.8)$$

Con ayuda de la forma de Langevin (2.1.2), podemos deducir la ecuación de Fokker-Planck [18]. Para ello usaremos que la solución (2.1.3) donde X_t está asociada a una densidad de probabilidad $P(x, t)$ que nos da la probabilidad $P(x, t)dx$ de medir X_t en un intervalo $x \leq X_t \leq x + dx$. Podemos determinar $P(x, t)$ como el promedio de la distribución de Dirac sobre una infinidad de trayectorias independientes:

$$P(x, t) = \langle \delta(x - X_t) \rangle_\xi. \quad (2.1.9)$$

Si derivamos con respecto al tiempo y representamos a la delta de Dirac como una transformada de Fourier podemos escribirlo como

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = \left\langle \frac{d}{dt} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-X_t)} dk \right\rangle_\xi, \quad (2.1.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-X_t)} (-ik) \frac{dX_t}{dt} dk \right\rangle_\xi, \quad (2.1.11)$$

$$(2.1.12)$$

reescribiendo el factor $e^{ik(x-X_t)}(-ik)$ como una derivada parcial $-\frac{\partial}{\partial x}e^{ik(x-X_t)}$ podemos derivar la solución de la ecuación de Langevin

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x, t) = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} -\frac{\partial}{\partial x} \left(e^{ik(x-X_t)} \right) (-\gamma(X_t - \mu_0) + \xi(t)) dk \right\rangle_{\xi}, \quad (2.1.13)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} \left\langle \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-X_t)} (-\gamma(X_t - \mu_0) + \xi(t)) dk \right\rangle_{\xi}, \quad (2.1.14)$$

observamos que la integral $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-X_t)}$ es la delta de Dirac $\delta(x - X_t)$

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} \left\langle \delta(x - X_t) (-\gamma(X_t - \mu_0) + \xi(t)) \right\rangle_{\xi}, \quad (2.1.15)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} \langle \delta(x - X_t) (-\gamma(X_t - \mu_0)) \rangle_{\xi} - \frac{\partial}{\partial x} \langle \delta(x - X_t) \xi(t) \rangle_{\xi}. \quad (2.1.16)$$

La ecuación (2.1.16) es el promedio respecto al ruido blanco y se reescribe como

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} \langle \delta(x - X_t) \rangle_{\xi} (-\gamma(x - \mu_0)) - \frac{\partial}{\partial x} \langle \delta(x - X_t) \xi(t) \rangle_{\xi}. \quad (2.1.17)$$

El promedio con respecto al ruido blanco de la delta de Dirac es $P(x, t)$, entonces

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} ((-\gamma(x - \mu_0))P(x, t)) - \frac{\partial}{\partial x} \langle \delta(x - X_t) \xi(t) \rangle_{\xi}. \quad (2.1.18)$$

El último término se calcula usando el teorema de Novikov [19]

$$\langle \xi(t) \delta(x - X_t) \rangle_{\xi} = -\Gamma \frac{\partial}{\partial x} P(x, t). \quad (2.1.19)$$

El cálculo para obtener la ecuación (2.1.19) se encuentra en el apéndice A. Así terminamos de escribir la ecuación (2.1.18) sustituyendo el último termino con la ecuación (2.1.19)

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} ((-\gamma(x - \mu_0))P(x, t)) + \frac{\partial}{\partial x} \Gamma \frac{\partial}{\partial x} P(x, t), \quad (2.1.20)$$

por comodidad escribimos $P(x, t) = P$, entonces tenemos la ecuación de Fokker-Planck del proceso de Ornstein-Uhlenbeck

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} (\gamma(x - \mu_0)P) + \Gamma \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}. \quad (2.1.21)$$

Nos damos cuenta que es una ecuación diferencial parcial parabólica con condición inicial $P(x, 0) = \delta(x - x_0)$ que escribimos como

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \Gamma \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \gamma(x - \mu_0) \frac{\partial P}{\partial x} + \gamma P. \quad (2.1.22)$$

Como tenemos condiciones de frontera tal que la distribución decae lo suficientemente rápido en infinito resolvemos la ecuación diferencial parcial usando la transformada de Fourier donde $\mathcal{F}[P(x, t)] = \mathcal{P}(k, t) = \mathcal{P}$, entonces la solución de la ecuación (2.1.22) es

$$\mathcal{P}(k, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{\Gamma k^2}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}) \right] \exp \left[-ik \left(\mu_0 + (x_0 - \mu_0)e^{-2\gamma t} \right) \right], \quad (2.1.23)$$

los detalles se encuentran en el apéndice B.

Para obtener la función de densidad de probabilidad usamos la transformada inversa de Fourier y hacemos un cambio de variable por comodidad, donde $a = \mu_0 + (x_0 - \mu_0)e^{-2\gamma t}$ y $\frac{1}{4\mu} = \frac{\Gamma}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t})$ entonces $\mu = \frac{\gamma}{2\Gamma(1 - e^{-2\gamma t})}$, con esto escribimos

$$\mathcal{P}(k, t) = \frac{\sqrt{2\mu}}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{2\pi} \left(\frac{1}{\sqrt{2\mu}} e^{-k^2/4\mu} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}, e^{-ika} \right), \quad (2.1.24)$$

aplicamos la transformada inversa de Fourier

$$P(x, t) = \sqrt{\frac{\mu}{\pi}} \left(\sqrt{2\pi} \mathcal{F}^{-1} \left[\frac{1}{\sqrt{2\mu}} e^{-k^2/4\mu} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ika} \right] \right), \quad (2.1.25)$$

$$P(x, t) = \sqrt{\frac{\mu}{\pi}} \left(e^{-\mu x^2} * \delta(x - a) \right) \quad (2.1.26)$$

$$P(x, t) = \sqrt{\frac{\mu}{\pi}} \left(e^{-\mu(x-a)^2} \right), \quad (2.1.27)$$

sustituyendo a y μ por los valores anteriores obtenemos la solución de la ecuación de Fokker-Planck (2.2)

$$P(x, t) = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi\Gamma(1 - e^{-2\gamma t})}} \exp \left[-\frac{\gamma}{2\Gamma} \frac{(x - (\mu_0 + (x_0 - \mu_0)e^{-\gamma t}))^2}{(1 - e^{-2\gamma t})} \right]. \quad (2.1.28)$$

Si hacemos $\mu_0 = 0$, obtenemos

$$P(x, t) = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi\Gamma(1 - e^{-2\gamma t})}} \exp \left[-\frac{\gamma}{2\Gamma} \frac{(x - x_0 e^{-\gamma t})^2}{(1 - e^{-2\gamma t})} \right], \quad (2.1.29)$$

que es el resultado obtenido en el libro del Dr. Hannes Risken [18].

Observamos que para todo tiempo es una distribución gaussiana (figura 2.2), en particular cuando es estacionaria en el límite

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P(x, t) = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi\Gamma}} \exp \left[-\frac{\gamma}{2\Gamma} (x - \mu_0)^2 \right], \quad (2.1.30)$$

Nos damos cuenta que su promedio es x_0 y varianza $\frac{\Gamma}{\gamma}$ que es exactamente lo que obtenemos en la ecuación (2.1.7) y cuando $s = t$ en la ecuación (2.1.8), respectivamente.

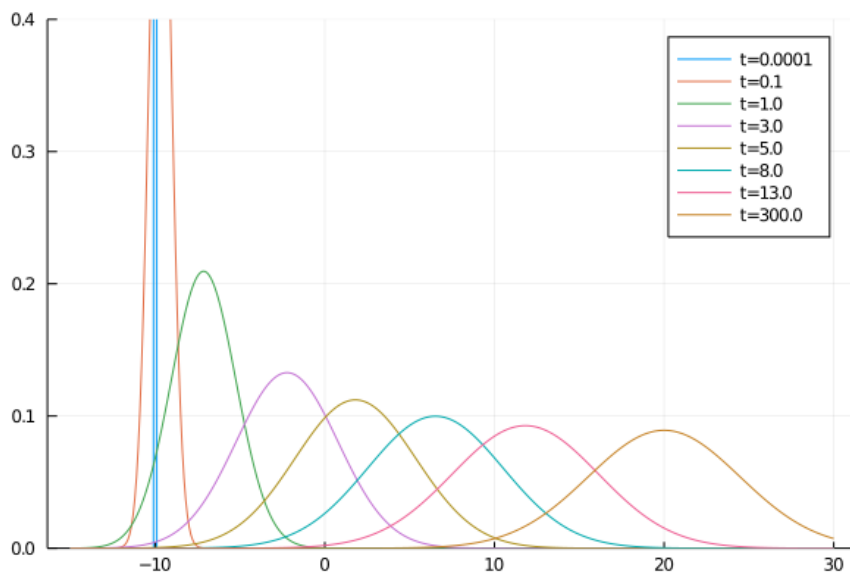


Figura 2.2: Ejemplo de la distribución obtenida de la ecuación de Fokker-Planck usando la ecuación (2.1.28) del proceso de Ornstein–Uhlenbeck con condición inicial en $x_0 = -10$, constantes $\gamma = 0.1$ y $\Gamma = 2$ y valor de amortiguamiento $\mu_0 = 20$. Se observan diferentes tiempos.

2.2. Ecuaciones de Frenet-Serret

Para el propósito de este trabajo es importante estudiar las ecuaciones diferenciales de Frenet-Serret ya que ayudan a describir la trayectoria $\vec{r}(t)$ de organismos que tienen una dinámica en tres dimensiones mediante la evolución de la triada de vectores unitarios tangente \hat{T} , normal \hat{N} y binormal \hat{B} que son una base ortonormal característica de la curva que genera cualquier partícula puntual.

La definición del vector unitario tangente $\hat{T}(t)$ es la dirección de la derivada de la posición, es decir la dirección de la velocidad que escribimos como

$$\hat{T}(t) = \frac{\frac{d\vec{r}}{dt}}{\left\| \frac{d\vec{r}}{dt} \right\|} = \frac{\vec{v}(t)}{\|\vec{v}(t)\|} = \frac{\vec{v}(t)}{v}, \quad (2.2.1)$$

también si derivamos el vector tangente y lo dividimos entre su norma obtenemos el vector normal $\hat{N}(t)$ sin embargo no lo podemos interpretar directamente como la dirección de la aceleración ya que esta se compone de una aceleración tangencial y normal

$$\hat{N}(t) = \frac{\frac{d\hat{T}}{dt}}{\left\| \frac{d\hat{T}}{dt} \right\|}. \quad (2.2.2)$$

Por otro lado el vector binormal \hat{B} debe ser ortonormal a los vectores tangente y normal, por lo que está definido como

$$\hat{B}(t) = \hat{T}(t) \times \hat{N}(t). \quad (2.2.3)$$

La función $\kappa := \left\| \frac{d\hat{T}}{ds} \right\|$ esta definida como la curvatura y se interpreta como un número que describe que tan alejada es una curva de una recta. La variable s es el arco de longitud propia de la curva $\vec{r}(t)$ dada por

$$s(t) = \int_0^t \left\| \frac{d}{dt'} \vec{r}(t') \right\| dt'. \quad (2.2.4)$$

Entonces la ecuación (2.2.2) la reescribimos como

$$\hat{N}(t) = \frac{\frac{d\hat{T}}{dt}}{\left\| \frac{d\hat{T}}{dt} \right\|}, \quad (2.2.5)$$

$$\hat{N}(t) = \frac{\frac{d\hat{T}}{dt}}{\left\| \frac{d\hat{T}}{ds} \frac{ds}{dt} \right\|}, \quad (2.2.6)$$

$$\hat{N}(t) = \frac{\frac{d\hat{T}}{dt}}{\kappa v}. \quad (2.2.7)$$

$$(2.2.8)$$

De esta última expresión obtenemos la primera ecuación de Frenet-Serret

$$\frac{d\hat{T}}{dt} = v\kappa\hat{N}. \quad (2.2.9)$$

Para deducir la siguiente ecuación de Frenet-Serret expandimos la derivada del vector normal en términos de la triada $\{\hat{T}, \hat{N}, \hat{B}\}$

$$\frac{d\hat{N}}{dt} = \left(\frac{d\hat{N}}{dt} \cdot \hat{T} \right) \hat{T} + \left(\frac{d\hat{N}}{dt} \cdot \hat{N} \right) \hat{N} + \left(\frac{d\hat{N}}{dt} \cdot \hat{B} \right) \hat{B}, \quad (2.2.10)$$

$$\frac{d\hat{N}}{dt} = - \left(\frac{d\hat{T}}{dt} \cdot \hat{N} \right) \hat{T} + \left(\frac{d\hat{N}}{dt} \cdot \hat{B} \right) \hat{B}, \quad (2.2.11)$$

$$\frac{d\hat{N}}{dt} = -v\kappa\hat{T} + \left(\frac{d\hat{N}}{dt} \cdot \hat{B} \right) \hat{B}. \quad (2.2.12)$$

La función $\tau := \frac{1}{v} \left(\frac{d\hat{N}}{dt} \cdot \hat{B} \right)$ se conoce como la torsión y se interpreta como la medida de que tan alejado es el movimiento de un plano, con esta definición obtenemos la siguiente ecuación de Frenet-Serret

$$\frac{d\hat{N}}{dt} = -v\kappa\hat{T} + v\tau\hat{B}. \quad (2.2.13)$$

Para la derivada del vector binormal hacemos la misma expansión para obtener la tercera ecuación de Frenet-Serret

$$\frac{d\hat{B}}{dt} = \left(\frac{d\hat{B}}{dt} \cdot \hat{T} \right) \hat{T} + \left(\frac{d\hat{B}}{dt} \cdot \hat{N} \right) \hat{N} + \left(\frac{d\hat{B}}{dt} \cdot \hat{B} \right) \hat{B}, \quad (2.2.14)$$

$$\frac{d\hat{B}}{dt} = - \left(\frac{d\hat{T}}{dt} \cdot \hat{B} \right) \hat{T} - \left(\frac{d\hat{N}}{dt} \cdot \hat{B} \right) \hat{N}, \quad (2.2.15)$$

$$\frac{d\hat{B}}{dt} = -v\tau\hat{N}. \quad (2.2.16)$$

Las tres expresiones (2.2.9), (2.2.13) y (2.2.16) son las tres ecuaciones diferenciales acopladas de Frenet-Serret dependientes del tiempo [20]

$$\frac{d\hat{T}}{dt} = v\kappa\hat{N}, \quad (2.2.17a)$$

$$\frac{d\hat{N}}{dt} = -v\kappa\hat{T} + v\tau\hat{B} \quad (2.2.17b)$$

$$\frac{d\hat{B}}{dt} = -v\tau\hat{N}. \quad (2.2.17c)$$

Podemos obtener una expresión explícita de la curvatura κ y la torsión τ en términos de vectores conocidos de la curva que describe cualquier partícula puntual en tres dimensiones, para ello recordemos que la aceleración la podemos calcular derivando la norma de la velocidad $v = \|\vec{v}(t)\|$ multiplicada por \hat{T} , ya que ambos son dependientes del parámetro temporal, y considerando la ecuación (2.2.1) y (2.2.2)

$$\vec{a}(t) = \frac{d}{dt}(v\hat{T}) = \hat{T} \frac{dv}{dt} + v \frac{d\hat{T}}{dt} = \hat{T} \frac{dv}{dt} + v\hat{N} \left\| \frac{d\hat{T}}{dt} \right\|, \quad (2.2.18)$$

con esto despejamos el vector normal y tener una expresión para \hat{B} en términos de la velocidad y la aceleración. Usando la ecuación (2.2.3) y nuevamente (2.2.1), obtenemos que

$$\hat{B} = \hat{T} \times \left(\frac{\vec{a}(t) - \frac{dv}{dt}\hat{T}}{v \left\| \frac{d\hat{T}}{dt} \right\|} \right), \quad (2.2.19)$$

$$\hat{B} = \frac{1}{v \left\| \frac{d\hat{T}}{dt} \right\|} \left(\hat{T} \times \vec{a}(t) \right), \quad (2.2.20)$$

$$\hat{B} = \frac{1}{v^2 \left\| \frac{d\hat{T}}{dt} \right\|} \left(\vec{v}(t) \times \vec{a}(t) \right). \quad (2.2.21)$$

Si recordamos que la norma del producto se puede calcular como

$$\|\vec{v}(t) \times \vec{a}(t)\| = \sqrt{(\vec{v}(t) \cdot \vec{v}(t))(\vec{a}(t) \cdot \vec{a}(t)) - (\vec{v}(t) \cdot \vec{a}(t))^2} = v^2 \left\| \frac{d\hat{T}}{dt} \right\|, \quad (2.2.22)$$

entonces el vector Binormal \hat{B} lo reescribimos como

$$\hat{B} = \frac{\vec{v}(t) \times \vec{a}(t)}{\|\vec{v}(t) \times \vec{a}(t)\|}. \quad (2.2.23)$$

Por otro lado se desarrollamos el producto vectorial con la ecuación (2.2.17a)

$$\vec{v}(t) \times \vec{a}(t) = \hat{T}v \times \left(\hat{T} \frac{dv}{dt} + v\hat{N} \left\| \frac{d\hat{T}}{dt} \right\| \right) = \hat{T}v \times v\hat{N} \left\| \frac{d\hat{T}}{dt} \right\|, \quad (2.2.24)$$

$$= v^3 \kappa (\hat{T} \times \hat{N}) = v^3 \kappa \hat{B}. \quad (2.2.25)$$

Entonces tenemos una expresión en términos de la velocidad y la aceleración para la curvatura

$$\kappa = \frac{\|\vec{v}(t) \times \vec{a}(t)\|}{v^3}. \quad (2.2.26)$$

Finalmente se puede también obtener una expresión para la torsión si derivamos la aceleración y considerando la ecuación (2.2.17a) que nos da la curvatura en términos de la derivada de la tangente y la normal. También usaremos la ecuación (2.2.17b) para sustituir la derivada del vector normal

$$\frac{d}{dt} \vec{a}(t) = \hat{T} \frac{d^2v}{dt^2} + \frac{dv}{dt} \frac{d\hat{T}}{dt} + \hat{N} \frac{d}{dt} (v^2 \kappa) + v^2 \kappa \frac{d\hat{N}}{dt}, \quad (2.2.27)$$

$$\frac{d}{dt} \vec{a}(t) = \hat{T} \frac{d^2v}{dt^2} + \frac{dv}{dt} v^2 \kappa \hat{N} + \hat{N} \frac{d}{dt} (v^2 \kappa) + v^2 \kappa (-v\kappa \hat{T} + v\tau \hat{B}), \quad (2.2.28)$$

$$\frac{d}{dt} \vec{a}(t) = \left(\frac{d^2v}{dt^2} - v^3 \kappa^2 \right) \hat{T} + \left(\frac{dv}{dt} v^2 \kappa + \frac{d}{dt} (v^2 \kappa) \right) \hat{N} + v^3 \kappa \tau \hat{B}. \quad (2.2.29)$$

Como se puede notar la derivada de la aceleración tiene la triada de vectores tangente, normal y binormal por lo que podemos hacer el producto escalar con el producto vectorial entre la velocidad y la aceleración, es decir

$$(\vec{v}(t) \times \vec{a}(t)) \cdot \left(\frac{d}{dt} \vec{a}(t) \right) = v^6 \kappa^2 \tau, \quad (2.2.30)$$

usando la ecuación (2.2.26) podemos obtener la torsión en términos de la velocidad, la aceleración y la derivada de la aceleración

$$\tau = \frac{(\vec{v}(t) \times \vec{a}(t)) \cdot \left(\frac{d}{dt} \vec{a}(t) \right)}{\|\vec{v}(t) \times \vec{a}(t)\|^2}. \quad (2.2.31)$$

Por último podemos obtener el vector de Darboux $\vec{\omega}$, que es la rotación instantánea de la triada de vectores $\{\hat{T}, \hat{N}, \hat{B}\}$ entorno al vector $\vec{\omega}$, con velocidad angular $\|\vec{\omega}\|$ [21]. Consideramos una partícula que viaja según una trayectoria descrita por $\vec{r}(t)$, cualquier rotación que sufra esta partícula en terminos del marco de referencia de Frenet-Serret estará descrita por la siguiente combinación lineal [22]

$$\vec{\omega} = \omega_1 \hat{T} + \omega_2 \hat{N} + \omega_3 \hat{B}. \quad (2.2.32)$$

Recordando la definición de velocidad angular

$$\frac{d}{dt} \vec{r}(t) = \vec{\omega} \times \vec{r}(t), \quad (2.2.33)$$

lo aplicamos para cada vector del sistema de referencia de Frenet-Serret [23]

$$\frac{d\hat{T}}{dt} = \vec{\omega} \times \hat{T} = \omega_3 \hat{N} - \omega_2 \hat{B}, \quad (2.2.34a)$$

$$\frac{d\hat{N}}{dt} = \vec{\omega} \times \hat{N} = -\omega_3 \hat{T} + \omega_1 \hat{B}, \quad (2.2.34b)$$

$$\frac{d\hat{B}}{dt} = \vec{\omega} \times \hat{B} = \omega_2 \hat{T} - \omega_1 \hat{N}, \quad (2.2.34c)$$

con ello comparamos las ecuaciones (2.2.17) y notar que la curvatura y la torsión son componentes del vector velocidad angular, además que $\omega_2 = 0$ significa que las rotaciones instantáneas solo suceden en el plano generado por el vector tangente \hat{T} y binormal \hat{B} . Por lo que obtenemos que el vector de Darboux es

$$\vec{\omega} = v\kappa \hat{B} + v\tau \hat{T}. \quad (2.2.35)$$

Si derivamos el vector de Darboux con la curvatura κ y la torsión τ constantes, obtenemos que es cero, lo que nos indica que la velocidad angular neta es constante en todo momento, más aún con estas suposiciones, pensando que la magnitud de la velocidad es constante y considerando la ecuación (2.2.17a) obtenemos la relación usual entre la velocidad tangencial y la velocidad angular

$$\frac{d}{dt} \vec{v}(t) = \frac{d}{dt} (\vec{\omega} \times \vec{r}), \quad (2.2.36)$$

$$v \frac{d\hat{T}}{dt} = \vec{\omega} \times \vec{v}(t), \quad (2.2.37)$$

$$v^2 \kappa \hat{N} = \vec{\omega} \times \vec{v}(t). \quad (2.2.38)$$

La norma de esta última ecuación es un resultado reportado en el artículo de Friedrich [11], es decir que para una curvatura constante siempre podemos escribirla como

$$\kappa = \frac{\|\vec{\omega} \times \vec{v}(t)\|}{v^2}. \quad (2.2.39)$$

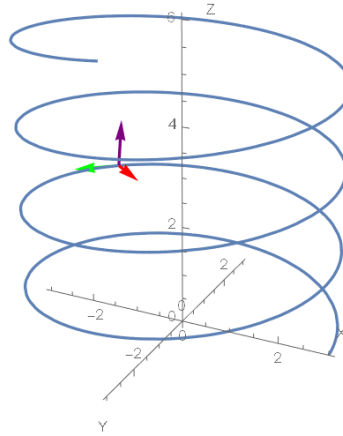


Figura 2.3: Ejemplo de la solución de las ecuaciones de Frenet-Serret que genera una hélice (ver apéndice C). El vector verde indica el vector tangente \hat{T} , en vector rojo el norma \hat{N} y el morado el binormal \hat{B} . Con $\kappa = \tau = \frac{3}{18} m^{-1}$ y $v = 50 m$.

Un caso particular es para una torsión y curvatura constantes. Las ecuaciones de Frenet-Serret describen hélices (ver figura 2.3), un ejemplo de ello es si consideramos el problema del ciclotrón con una componente de la velocidad en el eje Z constante. La demostración de este ejemplo está en el apéndice C. El problema que trataremos en esta tesis es el caso donde hay fluctuaciones de esta constante y para ello se utilizará el proceso antes mencionado en la sección 2.1, el proceso de Ornstein-Uhlenbeck debido a sus propiedades estadísticas.

2.3. Matrices Aleatorias

Las matrices aleatorias son aquellas cuyas entradas corresponden a una variable aleatoria determinada por una distribución de probabilidad dada, sus eigenvalores tienen propiedades estadísticas bien definidas de acuerdo al ensamble del que se trate. Un ejemplo de los más estudiados es el ensamble gaussiano, cuya característica es que son matrices hermitianas cuyas entradas pueden ser números reales, complejos o cuaterniones, estos últimos son una extensión de los números complejos, se componen de un número real y tres números imaginarios, se discutirá más adelante en la sección 2.4. Históricamente estas matrices se usaron para describir los niveles energéticos de núcleos pesados y también describen sistemas cuánticos con simetrías temporales o

rotacionales. Estas características se pueden definir de manera formal.

El ensamble gaussiano ortogonal (GOE, del inglés Gaussian Orthogonal Ensemble) se define como el conjunto de matrices reales simétricas que cumplen:

1. La probabilidad $P(H)dH$ que la matriz H pertenece al elemento de volumen

$$dH = \prod_{k \leq j} dH_{kj}, \quad (2.3.1)$$

es invariante ante transformaciones reales ortogonales W :

$$P(H')dH' = P(H)dH, \quad (2.3.2)$$

donde $H' = W^T H W$ y $W^T W = W W^T = I$, donde W es una matriz real ortogonal.

2. La función de densidad de probabilidad $P(H)$ es el producto de funciones f_{kj} de probabilidad de cada entrada de H_{kj} , las cuales dependen de una sola variable:

$$P(H) = \prod_{k \leq j} f_{kj}(H_{kj}), \quad (2.3.3)$$

dicho de otro modo que los elementos H_{kj} , para $k \leq j$ son estadísticamente independientes.

Podemos interpretarlo como el conjunto hamiltonianos que son invariantes a la inversión temporal y rotaciones.

El ensamble gaussiano simpléctico (GSE, del inglés Gaussian Symplectic Ensemble) se define como el conjunto de matrices cuaterniónicas auto-duales hermitianas, esto quiere decir que las entradas de esta matriz son números cuaternionicos, una extensión de los complejos que tienen una parte real y tres partes imaginarias. Por otro lado que sean auto-duales hermitianas nos referimos a que las matrices tienen su parte real simétrica y su parte imaginaria antisimétrica, que cumplen:

1. La probabilidad $P(H)dH$ que la matriz H pertenece al elemento de volumen

$$dH = \prod_{k \leq j} dH_{kj}^{(0)} \prod_{\lambda=1}^3 \prod_{k < j} dH_{kj}^{(\lambda)}, \quad (2.3.4)$$

donde $\lambda = 0, 1, 2, 3$ denotan a las unidades reales e imaginarias i, j y k , respectivamente, es invariante ante transformaciones simplécticas W tal que:

$$P(H')dH' = P(H)dH, \quad (2.3.5)$$

donde $H' = W^R H W$ y $W^R W = W W^R = I$, en este caso se denota a W^R como la matriz transpuesta conjugada de W .

2. La función de densidad de probabilidad $P(H)$ es el producto de funciones f_{kj} de probabilidad de cada entrada de H_{kj} , las cuales dependen de una sola variable:

$$P(H) = \prod_{k \leq j} f_{kj}^{(0)}(H_{kj}^{(0)}) \prod_{\lambda=1}^3 \prod_{k < j} f_{kj}^{(\lambda)}(H_{kj}^{(\lambda)}), \quad (2.3.6)$$

Este tipo de hamiltonianos son invariantes ante la inversión temporal, en este caso no se obtiene la invarianza rotacional.

El ensamble gaussiano unitario (GUE, del inglés Gaussian Unitary Ensemble) se define como el conjunto de matrices complejas hermitianas, que cumplen:

1. La probabilidad $P(H)dH$ que la matriz H pertenece al elemento de volumen

$$dH = \prod_{k \leq j} dH_{kj}^{(0)} \prod_{k < j} dH_{kj}^{(1)}, \quad (2.3.7)$$

es invariante ante transformaciones unitarias complejas U :

$$P(H')dH' = P(H)dH, \quad (2.3.8)$$

donde $H' = U^{(-1)} H U$, donde U es una matriz unitaria.

2. La función de densidad de probabilidad $P(H)$ es el producto de funciones f_{kj} de probabilidad de cada entrada de H_{kj} , las cuales dependen de una sola variable:

$$P(H) = \prod_{k \leq j} f_{kj}^{(0)}(H_{kj}^{(0)}) \prod_{k < j} f_{kj}^{(1)}(H_{kj}^{(1)}), \quad (2.3.9)$$

Este tipo de hamiltonianos no son invariantes ante rotaciones ni inversión temporal.

Dadas estas definiciones se puede especificar la función de densidad de probabilidad $P(H)$ con el teorema de Porter y Rosenweig [24] donde para los tres casos se escribe [14]

$$P(H) = \exp(-a \operatorname{tr}(H^2) + b \operatorname{tr}(H) + c), \quad (2.3.10)$$

donde a es un real positivo y b y c son reales. Se nombran como ensambles Gaussianos ya que su distribución tiene la forma de una distribución normal. A partir de la

ecuación (2.3.10) [25] podemos definir de otra forma los ensambles Gaussianos con los elementos de sus respectivas matrices.

Una matriz hermitiana de $N \times N$ pertenece al ensamble gaussiano ortogonal si los elementos de la diagonal tienen una distribución normal con promedio $\mu = 0$ y varianza $\sigma^2 = 1$, $N(0, 1)$, y los elementos triangulares superiores una distribución normal $N(0, \frac{1}{2})$. De modo que la función de densidad de probabilidad es

$$P(H_{GOE}) = \prod_{k=1}^N \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{H_{kk}^2}{2}} \prod_{1 \leq k < j \leq N} \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-H_{kj}^2} = A_N \prod_{k,j=1}^N e^{-\frac{1}{2}H_{kj}^2} \quad (2.3.11)$$

$$P(H_{GOE}) = A_N \exp\left(-\frac{1}{2} \text{tr}(H_{GOE}^2)\right). \quad (2.3.12)$$

Una matriz hermitiana de $N \times N$ pertenece al ensamble gaussiano unitario si sus elementos de la diagonal son reales con distribución normal $N(0, \frac{1}{\sqrt{2}})$, mientras que los elementos triangulares superiores tienen una distribución normal en su parte real $N(0, \frac{1}{2})$ e imaginaria $N(0, \frac{1}{2})$. Denotaremos un número complejo aleatorio como $N(0, \frac{1}{2}) + iN(0, \frac{1}{2})$ donde se escribe su distribución en su parte real e imaginaria. Esta notación es útil para obtener la distribución de la norma de un número complejo aleatorio con densidades de probabilidad independientes entre sus componentes. Con esto la función de densidad de probabilidad es

$$P(H_{GUE}) = \prod_{k=1}^N \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-H_{kk}^2} \prod_{1 \leq k < j \leq N} \frac{2}{\pi} e^{-2|H_{kj}|^2} = A_N \prod_{k,j=1}^N e^{-|H_{kj}|^2}, \quad (2.3.13)$$

$$P(H_{GUE}) = A_N \exp\left(-\text{tr}(H_{GUE}^2)\right). \quad (2.3.14)$$

Para definir el último ensamble, vale la pena mencionar que las matrices de cuaterniones se pueden ver como matrices de $N \times N$ cuyas entradas son matrices de 2×2 de la forma

$$\begin{bmatrix} z & w \\ -\bar{w} & \bar{z} \end{bmatrix}, \quad (2.3.15)$$

donde z y w son números complejos. Esta matriz de 2×2 es un cuaternio de forma matricial cuya base está dada por matrices complejas que se escriben como

$$\mathbf{e}_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{e}_1 = \begin{bmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{bmatrix}, \quad \mathbf{e}_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{e}_3 = \begin{bmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.3.16)$$

entonces cualquier cuaternio q se puede escribir en términos de estas matrices de la forma $q = c_0\mathbf{e}_0 + c_1\mathbf{e}_1 + c_2\mathbf{e}_2 + c_3\mathbf{e}_3$, con c_i reales e $i = 0, 1, 2, 3$. También podemos definir su forma dual o su conjugado \bar{q}

$$\bar{q} = c_0\mathbf{e}_0 - c_1\mathbf{e}_1 - c_2\mathbf{e}_2 - c_3\mathbf{e}_3, \quad (2.3.17)$$

con esta definición el conjugado de la forma matricial de un cuaternio es

$$\begin{bmatrix} \bar{z} & -w \\ \bar{w} & z \end{bmatrix}. \quad (2.3.18)$$

Para construir una matriz hermitiana podemos considerar que los elementos de la matriz (2.3.18) también son matrices z y w con elementos z_{kj} y w_{kj} con ello \bar{z} y \bar{w} son las matrices cuyos elementos son conjugados \bar{z}_{kj} y \bar{w}_{kj} respectivamente.

Con esto podemos dar la definición alterna para una matriz hermitiana de $N \times N$ que pertenece al ensamble gaussiano simpléctico. Los elementos de cada diagonal z_{jj} de los cuaterniones deben ser reales, estos deben ser de distribución normal $N(0, \frac{1}{2})$, mientras que los elementos triangulares superiores de la forma $z_{kj} = u_{kj} + iv_{kj}$ y $w_{kj} = u'_{kj} + iv'_{kj}$ tienen una distribución normal de la forma $N(0, \frac{1}{2\sqrt{2}}) + iN(0, \frac{1}{2\sqrt{2}})$. De esta forma podemos dar la función de densidad de probabilidad para este caso, que es

$$P(H_{GSE}) = \prod_{k=1}^N \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-2z_{kk}^2} \prod_{1 \leq k < j \leq N} \frac{4}{\pi} e^{-4|z_{kj}|^2} \prod_{1 \leq k < j \leq N} \frac{4}{\pi} e^{-4|w_{kj}|^2} \quad (2.3.19)$$

$$= A_N \prod_{k,j=1}^N e^{-2|z_{kj}|^2} \prod_{k,j=1}^N e^{-2|w_{kj}|^2}, \quad (2.3.20)$$

$$P(H_{GSE}) = A_N \exp\left(-2 \operatorname{tr}(H_{GSE}^2)\right). \quad (2.3.21)$$

Se puede notar que la función de densidad de probabilidad de las ecuaciones (2.3.12), (2.3.14) y (2.3.21) son perfectamente equivalentes a las primeras definiciones (2.3.3), (2.3.9) y (2.3.6), respectivamente, mostradas anteriormente junto con la distribución obtenida del teorema de Porter y Rosenweig (2.3.10).

Al estar considerando matrices hermitianas sabemos que sus eigenvalores existen y son reales, por lo que podemos preguntarnos sobre cual serán las propiedades estadísticas de estos, que se obtienen de la función de densidad de probabilidad $P(H)$. La densidad de probabilidad conjunta de los eigenvalores se calcula para cada ensamble utilizando la propiedad de que las matrices hermitianas son diagonalizables, por lo tanto su traza es la suma de sus eigenvalores, y usando la expresión obtenida del teorema de Porter y Rosenweig (2.3.10) en términos de los eigenvalores y otros parámetros. Los detalles de estos cálculos están en la referencia [14]. Se obtiene la expresión

$$P_{N\beta}(\lambda_1, \dots, \lambda_N) = C_{N\beta} \exp\left(-\frac{1}{2}\beta \sum_{j=1}^N \lambda_j^2\right) \prod_{1 \leq k < j \leq N} |\lambda_k - \lambda_j|^\beta, \quad (2.3.22)$$

que dependiendo de β se obtiene la distribución para cada ensamble, donde N es la dimensión de la matriz y $\beta = 1$ se refiere al ensamble Gaussiano ortogonal, $\beta = 2$ si es unitario y $\beta = 4$ para el simpléctico.

Con la densidad de probabilidad conjunta (2.3.22) se puede calcular la distribución marginal

$$\sigma_N(\lambda) = N \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} P_{N\beta}(\lambda, \lambda_2, \dots, \lambda_N) d\lambda_2 \cdots d\lambda_N, \quad (2.3.23)$$

para matrices muy grandes se puede hacer una analogía con un gas de N partículas con interacciones de pares coulombianas en un medio con una densidad de carga, mejor conocido como un gas logarítmico.

Para describir esta analogía recordemos ensamble canónico que es el formalismo de la física estadística aplicado a un sistema de N partículas que se mueven en un dominio Ω a una temperatura T . Se obtiene que la función de densidad de probabilidad para el evento de partículas en as posiciones $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N$ es

$$P(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{Z_N} e^{-\beta U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)}, \quad (2.3.24)$$

donde $U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ es la engría potencial total del sistema, $\beta := \frac{1}{k_B T}$ (k_B es la constante de Boltzmann) y Z_N es una constante de normalización.

Para un potencial logarítmico coulombiano de energía U , se puede calcular pensando que las partículas se mueven en un plano. El potencial electrostático Φ en el punto \vec{r} debido a la carga \vec{r}' , es obtenida de la solución de la ecuación de Poisson [25]

$$\nabla_{\vec{r}}^2 \Phi(\vec{r}, \vec{r}') = -2\pi \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2.3.25)$$

$$\Phi(\vec{r}, \vec{r}') = -\log(|\vec{r} - \vec{r}'|/l), \quad (2.3.26)$$

donde l es una longitud arbitraria, por simplicidad usaremos $l = 1$.

Este sistema se compone de N partículas con carga q . Si solo estuvieran las partículas cargadas, estas se repelerían entre ellas hasta la frontera, para evitar esto se puede utilizar una densidad de carga externa de $-q\rho_b(\vec{r})$ de tal modo que $\int_{\Omega} \rho_b(\vec{r}) d\vec{r} = N$. La energía potencial total U es la suma de la energía electrostática de la interacción entre partículas

$$U_1 := -q^2 \sum_{1 \leq k < j \leq N} \log|\vec{r}_k - \vec{r}_j|, \quad (2.3.27)$$

las partículas y la densidad de carga externa $-q\rho_b(\vec{r})$

$$U_2 = q^2 \sum_{k=1}^N V(\vec{r}_k) \quad (2.3.28)$$

donde

$$V(\vec{r}_k) := \int_{\Omega} \log|\vec{r}_k - \vec{r}| \rho_b(\vec{r}) d\vec{r}, \quad (2.3.29)$$

y la interacción la densidad de carga externa $-q\rho_b(\vec{r})$, consigo misma

$$U_3 = -\frac{q^2}{2} \int_{\Omega} d\vec{r}' \rho_b(\vec{r}') \int_{\Omega} d\vec{r} \rho_b(\vec{r}) \log|\vec{r}' - \vec{r}| = -\frac{q^2}{2} \int_{\Omega} \rho_b(\vec{r}') V(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (2.3.30)$$

Como $U = U_1 + U_2 + U_3$ entonces podemos sustituirlo en la ecuación del ensamble canónico (2.3.24), por lo tanto la densidad de probabilidad de un gas logarítmico es

$$P(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = e^{-\beta U_3} \prod_{k=1}^N e^{-\beta q^2 V(\vec{r}_k)} \prod_{1 \leq k < j \leq N} |\vec{r}_k - \vec{r}_j|^{\beta q^2}. \quad (2.3.31)$$

Si comparamos la densidad de probabilidad de un gas logarítmico (2.3.31) y la densidad de probabilidad de los eigenvalores de las matrices hermitianas (2.3.22) podemos observar que el potencial $V(\vec{r}_k)$ que genera la densidad de carga externa $-q\rho_b(\vec{r})$, debe ser armónico, de la forma $\frac{x^2}{2} + C$, entonces la posición de las partículas cargadas externas corresponde idénticamente a la localización de los eigenvalores, más aun la densidad de carga $-q\rho_b(y) = -q\sigma_N(y)$ está dada por la ecuación integral

$$\frac{x^2}{2} + C = \int_{-\infty}^{\infty} \sigma_N(y) \log|x - y| dy, \quad (2.3.32)$$

los detalles de esta analogía se pueden consultar en la referencia [25], donde el resultado es la distribución semi-circular de Wigner (ver figura 2.4)

$$\sigma_N(\lambda) = \frac{2}{\pi} \frac{1}{\sqrt{2N\beta}} \sqrt{1 - \frac{\lambda^2}{2N\beta}}, \quad (2.3.33)$$

en el dominio $|\lambda| < \sqrt{2N\beta}$.

El ensamble gaussiano tiene otras propiedades estadísticas de los eigenvalores que valen la pena mencionar como la distribución de espaciamiento donde si tenemos una matriz de dimensión N y ordenamos los eigenvalores $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \lambda_3 \leq \dots \leq \lambda_N$ podemos obtener densidad de probabilidad de la cantidad $\lambda_k - \lambda_j$ donde $k > j$ a esto se le conoce como la distribución de Wigner surmise. Por último el eigenvalor más grande también tiene la distribución de Tracy-Widom asociada [26].

En la teoría de matrices aleatorias no solo están involucrados los hamiltonianos, si no que se puede extender a matrices unitarias y ortogonales en general que denotaremos como S cuyos eigenvalores son de la forma $e^{i\theta_j}$, donde denotaremos estos ángulos θ_j como eigenfases que pueden tener un valor en el intervalo $[0, 2\pi]$.

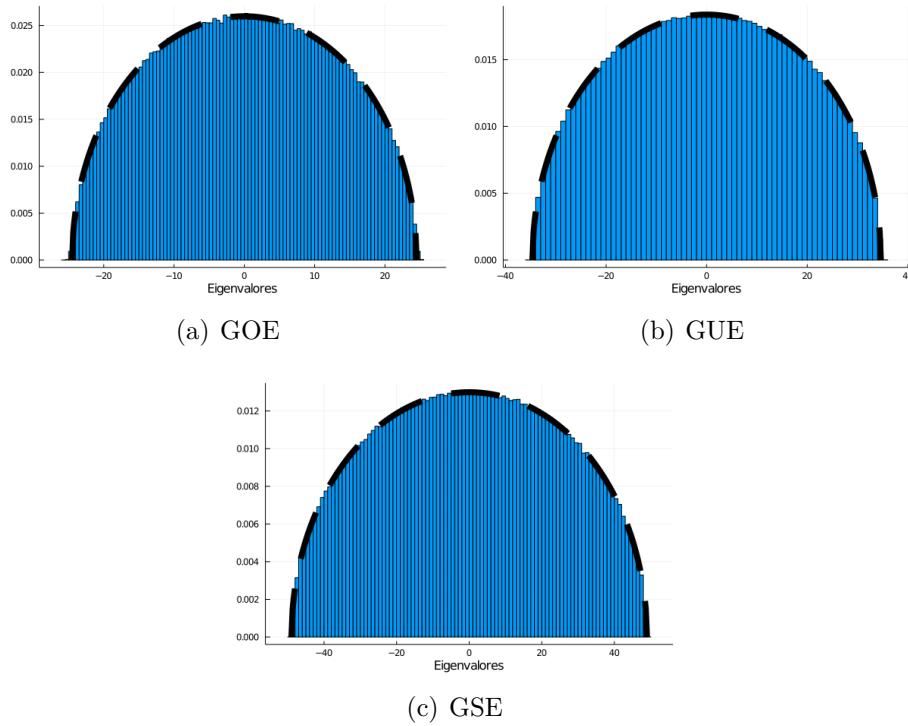


Figura 2.4: Distribuciones de los eigenvalores de 1000 matrices pertenecientes a los ensambles gaussianos de 300×300 con la distribución circular normalizada.

A este conjunto se le conoce como ensamble circular. El ensamble que se tratará en esta tesis será el ensamble real circular o en sus siglas en inglés CRE que se pueden interpretar como rotaciones reales en tres dimensiones. Más adelante en el siguiente capítulo se dará detalles como construir estas matrices en términos de la curvatura y torsión estocástica de tal manera que describa la dinámica de una partícula helicoidal.

2.4. Cuaterniones de Rotaciones

En secciones anteriores se ha expuesto características de las matrices aleatorias y de las ecuaciones de Frenet-Serret. En el siguiente capítulo se desarrollará la conexión y para ello hay que mencionar a los cuaterniones como una representación de las rotaciones en tres dimensiones. Por la sección anterior sabemos que un cuaternión se puede escribir de forma matricial, sin embargo la forma usual de estos números cuaterniónicos es

$$q = c_0 + ic_1 + jc_2 + kc_3, \tag{2.4.1}$$

donde c_0, c_1, c_2, c_3 son números reales. También se puede escribir un cuaternión como

$$q = q_0 + \mathbf{q}, \quad (2.4.2)$$

donde $\mathbf{q} = ic_1 + jc_2 + kc_3$ que también se puede escribir en forma ordenada como $\mathbf{q} = (c_1, c_2, c_3)$ que corresponde a la parte imaginaria con i, j y k que cumplen con la siguientes operaciones

$$i^2 = j^2 = k^2 = ijk = -1. \quad (2.4.3)$$

Los cuaterniones pueden sumarse y multiplicarse. Si $p = a_0 + ia_1 + ja_2 + ka_3$ y $q = b_0 + ib_1 + jb_2 + kb_3$ son cuaternione, estas operaciones se definen como:

1. Suma

$$p + q = (a_0 + b_0) + i(a_1 + b_1) + j(a_2 + b_2) + k(a_3 + b_3); \quad (2.4.4)$$

2. Multiplicación

$$\begin{aligned} pq = & (a_0b_0 - a_1b_1 - a_2b_2 - a_3b_3) + i(a_0b_1 + a_1b_0 + a_2b_3 - a_3b_2) \\ & + j(a_0b_2 - a_1b_3 + a_2b_0 + a_3b_1) + k(a_0b_3 + a_1b_2 - a_2b_1 + a_3b_0). \end{aligned} \quad (2.4.5)$$

Otra manera de ver a los cuaterniones es en su forma polar, al igual que los números complejos, este es obtenido con la norma $|q|^2 = c_0^2 + c_1^2 + c_2^2 + c_3^2$ y la norma de la parte imaginaria cuaterniónica o un cuaternio puro $|\mathbf{q}|^2 = c_1^2 + c_2^2 + c_3^2$, en este caso es

$$q = |q| \left(\cos \theta + \frac{\mathbf{q}}{|\mathbf{q}|} \sin \theta \right). \quad (2.4.6)$$

El ángulo θ se mide desde el cuaternio q hasta el eje de la componente real en el espacio de los cuaternios. Esta última representación será de ayuda para ver que estos números son una excelente representación de las rotaciones en tres dimensiones. Se define la rotación de cuaterniones como la función

$$\rho_p(q) = pqp^{-1}, \quad (2.4.7)$$

que indica que rota q con respecto a p , donde p^{-1} es el inverso del cuaternión p expresado como $p^{-1} = \frac{\bar{p}}{|p|^2}$. Como la función $\rho_p(q)$ también es un cuaternión, esta se puede representar como la matriz

$$\frac{1}{|p|^2} \begin{pmatrix} |p|^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a^2 + b^2 - c^2 - d^2 & 2(bc - ad) & 2(bd + ac) \\ 0 & 2(bc + ad) & a^2 + c^2 - b^2 - d^2 & 2(cd - ab) \\ 0 & 2(bd - ac) & 2(cd + ab) & a^2 + d^2 - b^2 - c^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} \quad (2.4.8)$$

(los detalles del calculo están en la referencia [27]). En este caso el cuaternión de la rotación $p = a + ib + jc + kd$. Si restringimos el mapeo a solo el subespacio de los cuaterniones puros \mathbf{q} , es decir los que no tienen parte real, es equivalente a la matriz de rotación de la fórmula de Euler-Rodrigues, donde $a^2 + b^2 + c^2 + d^2 = 1$ [28], ya que si evaluamos la rotación de cuaterniones con un cuaternion puro $\rho_p(\mathbf{q})$ esta será otro cuaternión puro [27]. Que los coeficientes cumplan la condición anterior es equivalente a que el cuaternión p sea unitario. También es posible escoger coeficientes para p que describan explícitamente el eje y ángulo de rotación $\mathbf{u} = (u_x, u_y, u_z)$ y θ , respectivamente, es decir

$$a = \cos \frac{\theta}{2}, \quad (2.4.9a)$$

$$b = u_x \sin \frac{\theta}{2}, \quad (2.4.9b)$$

$$c = u_y \sin \frac{\theta}{2}, \quad (2.4.9c)$$

$$d = u_z \sin \frac{\theta}{2}. \quad (2.4.9d)$$

Esto permite dar una relación entre un cuaternion unitario p con una matriz de rotación que denotaremos con R

$$p = \left(\cos \frac{\theta}{2} + \mathbf{u} \sin \frac{\theta}{2} \right) \leftrightarrow R = \begin{bmatrix} c\theta + u_x^2(1 - c\theta) & u_x u_y(1 - c\theta) - u_z s\theta & u_x u_z(1 - c\theta) + u_y s\theta \\ u_y u_x(1 - c\theta) + u_z s\theta & c\theta + u_y^2(1 - c\theta) & u_y u_z(1 - c\theta) - u_x s\theta \\ u_z u_x(1 - c\theta) - u_y s\theta & u_z u_y(1 - c\theta) + u_x s\theta & c\theta + u_z^2(1 - c\theta) \end{bmatrix}. \quad (2.4.10)$$

Por comodidad en la matriz denotaremos a las funciones trigonométricas como $c\theta = \cos \theta$ y $s\theta = \sin \theta$ [29, 30].

Se puede usar esta representación para multiplicar de forma más simple las matrices de rotación. Si componemos dos rotaciones en su forma de cuaterniones, donde p y p' son unitarios se obtiene que

$$\rho_{p'} \circ \rho_p(q) = \rho_{p'}(pq\bar{p}) = p'pq\bar{p}\bar{p}', \quad (2.4.11)$$

donde el cuaternion resultante del producto $p'p$ es equivalente a multiplicar las dos matrices de rotación asociadas $R'R$. En el siguiente capítulo se darán detalles usando que el producto de cuaterniones se puede ver como

$$p'p = (p'_0 p_0 - \mathbf{p}' \cdot \mathbf{p}) + (p_0 \mathbf{p}' + p'_0 \mathbf{p} + \mathbf{p}' \times \mathbf{p}), \quad (2.4.12)$$

donde el primer termino $p'_0 p_0 - \mathbf{p}' \cdot \mathbf{p}$ es la parte real y el segundo termino $p_0 \mathbf{p}' + p'_0 \mathbf{p} + \mathbf{p}' \times \mathbf{p}$ es la parte imaginaria en notación ordenada donde se ha usado el producto

vectorial y escalar usuales. Se puede notar que el producto de cuaterniones no es conmutativo. Usando esta operación se puede obtener de manera iterada los nuevos ángulos y ejes de rotación de manera más eficiente y generar matrices de rotación, producto de otras matrices. Es decir que con cuaterniones se pueden generar matrices aleatorias de Frenet-Serret pertenecientes al ensamble de las matrices aleatorias circulares ortogonales reales o en sus siglas en inglés CRE, que se mencionó en la sección anterior.

Análisis de Trayectorias Helicoidales Estocásticas

Este capítulo usará todos los temas anteriores para desarrollar el algoritmo y la conexión que se propone entre matrices aleatorias y las ecuaciones de Frenet-Serret. Se exhibirá que las ecuaciones de Frenet-Serret tienen una solución general en términos de una matriz de rotación \mathcal{R} determinada por la curvatura y la torsión, la cual si se reescribe en su forma numérica es el producto de otras rotaciones R_n , las cuales se pueden tratar analíticamente. Posteriormente con el resultado de analizar las rotaciones R_n podemos usar los cuaterniones para reemplazar las matrices R_n y reducir las operaciones para generar las matrices de rotación \mathcal{R} con ayuda de la fórmula Euler-Rodrigues. Por último se analiza algunos aspectos estadísticos de las eigenfases y eigenejes de las matrices \mathcal{R} .

3.1. Las Ecuaciones Estocásticas de Frenet-Serret

Como se menciona en el capítulo anterior el movimiento helicoidal puede ser descrito por las ecuaciones de Frenet-Serret donde la curvatura y la torsión son constantes a lo largo de la trayectoria $\vec{r}(t)$. Queremos usar como base esta observa-

ción para estudiar el movimiento helicoidal de partículas activas. Muchos organismos se mueven a lo largo de trayectorias aproximadamente helicoidales salvo por un ruido térmico que se puede modelar a partir de procesos estocásticos. Como se ve en las ecuaciones del apéndice C, el efecto esperado es que tanto el radio como la distancia entre cada espira se vea alterado aleatoriamente conforme evoluciona la caminata de la partícula helicoidal.

Recordemos que la posición de una partícula está dada por

$$\frac{d\vec{\mathbf{x}}}{dt} = v\hat{T} \quad (3.1.1)$$

donde v es la rapidez de nado, o la rapidez de la partícula activa que consideraremos constante por simplicidad. La dirección de nado, dada por \hat{T} se puede obtener en cada instante de tiempo a partir de las ecuaciones de Frenet-Serret. Como se vio en la sección 2.2. Las ecuaciones de Frenet-Serret dependen de la curvatura $\kappa(t)$ y al torsión $\tau(t)$ que en este caso serán estocásticas y determinadas por el proceso de Ornstein–Uhlenbeck ya que es estacionario, gaussiano y de correlación decreciente exponencialmente. Para ello estos procesos están descritos por las siguiente ecuaciones

$$\frac{d\kappa}{dt} = -\gamma_\kappa(\kappa - \langle\kappa\rangle) + \xi_\kappa(t), \quad (3.1.2)$$

$$\frac{d\tau}{dt} = -\gamma_\tau(\tau - \langle\tau\rangle) + \xi_\tau(t), \quad (3.1.3)$$

donde τ y κ es la torsión y la curvatura respectivamente con unidades del inverso de la longitud, los términos $\langle\tau\rangle$ y $\langle\kappa\rangle$ son los valores promedio y las ξ_κ, ξ_τ son dos ruidos blancos. Integrando con el método de Euler obtenemos la curvatura κ_n y la torsión τ_n en forma discreta [31]

$$\kappa_{n+1} = \kappa_n - \gamma_\kappa\Delta t(\kappa_n - \langle\kappa\rangle) + \sqrt{2D_\kappa\Delta t}\Delta W, \quad (3.1.4)$$

$$\tau_{n+1} = \tau_n - \gamma_\tau\Delta t(\tau_n - \langle\tau\rangle) + \sqrt{2D_\tau\Delta t}\Delta W. \quad (3.1.5)$$

En este caso aparecen las constantes D_κ y D_τ que tienen que ver con las fluctuaciones térmicas, fenómenos internos de la célula y del mismo medio [1]. Y ΔW es el proceso de Wiener que es un número aleatorio con promedio 0 y varianza 1.

Para hacer las simulaciones las ecuaciones (3.1.4) y (3.1.5) las escribiremos de forma adimensional dividiendo las dos ecuaciones entre el promedio de la curvatura $\langle\kappa\rangle$ y definiendo el parámetro temporal adimensional como $\Delta t' = \gamma_\kappa\Delta t$. Obtenemos los procesos de Ornstein–Uhlenbeck adimensionales

$$\kappa'_{n+1} = \kappa'_n - \Delta t'(\kappa'_n - 1) + \sqrt{2D'_\kappa\Delta t'}\Delta W, \quad (3.1.6)$$

$$\tau'_{n+1} = \tau'_n - \gamma\Delta t'(\tau'_n - \langle\zeta\rangle) + \sqrt{2D'_\tau\Delta t'}\Delta W, \quad (3.1.7)$$

donde

$$\begin{aligned} \kappa'_{n+1} &= \frac{\kappa_{n+1}}{\langle \kappa \rangle}, & D'_\kappa &= \frac{D_\kappa}{\gamma_\kappa \langle \kappa \rangle^2}, & \gamma &= \frac{\gamma_\tau}{\gamma_\kappa}, \\ \tau'_{n+1} &= \frac{\tau_{n+1}}{\langle \tau \rangle}, & D'_\tau &= \frac{D_\tau}{\gamma_\kappa \langle \kappa \rangle^2}, & \langle \zeta \rangle &= \frac{\langle \tau \rangle}{\langle \kappa \rangle}. \end{aligned}$$

Por otro lado la solución de la ecuación (3.1.1) con el método de Euler

$$\vec{\mathbf{r}}_{n+1} = \vec{\mathbf{r}}_n + \Delta t v \hat{T}, \quad (3.1.8)$$

la podemos escribir de forma adimensional si la multiplicamos por el promedio de la curvatura $\langle \kappa \rangle$ y usando el parámetro temporal adimensional $\Delta t' = \gamma_\kappa \Delta t$ obtenemos

$$\vec{\mathbf{r}}'_{n+1} = \vec{\mathbf{r}}'_n + \Delta t' v' \hat{T}, \quad (3.1.9)$$

donde

$$\vec{\mathbf{r}}'_n = \vec{\mathbf{r}}_n \langle \kappa \rangle, \quad v' = \frac{\langle \kappa \rangle v}{\gamma_\kappa}.$$

Para resolver las ecuaciones estocásticas de Frenet-Serret, es decir las ecuaciones de Frenet-Serret (2.2.17) con las variables de curvatura $\kappa(t)$ y torsión $\tau(t)$ determinadas por los procesos de Ornstein–Uhlenbeck, las escribimos en su forma matricial

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \hat{T} \\ \hat{N} \\ \hat{B} \end{bmatrix} = v \begin{bmatrix} 0 & \kappa(t) & 0 \\ -\kappa(t) & 0 & \tau(t) \\ 0 & -\tau(t) & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{T} \\ \hat{N} \\ \hat{B} \end{bmatrix}, \quad (3.1.10)$$

cuya solución formal corresponde al de un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias

$$\begin{bmatrix} \hat{T} \\ \hat{N} \\ \hat{B} \end{bmatrix} = \exp\left(\int_0^t \Omega dt'\right) \begin{bmatrix} \hat{T}_0 \\ \hat{N}_0 \\ \hat{B}_0 \end{bmatrix}, \quad \Omega = v \begin{bmatrix} 0 & \kappa(t') & 0 \\ -\kappa(t') & 0 & \tau(t') \\ 0 & -\tau(t') & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.1.11)$$

en este caso la integral sobre la matriz Ω indica que integramos en cada entrada de la matriz, y la exponencial evaluada en la nueva matriz es evaluarla en la serie de Taylor de la función exponencial. De esta forma discretizamos la triada de ecuaciones integrando de t_n a $t_n + \Delta t$, entonces la integral de la matriz Ω la escribimos como

$$\int_{t_n}^{t_n + \Delta t} \Omega dt' \approx \Omega_n \Delta t, \quad (3.1.12)$$

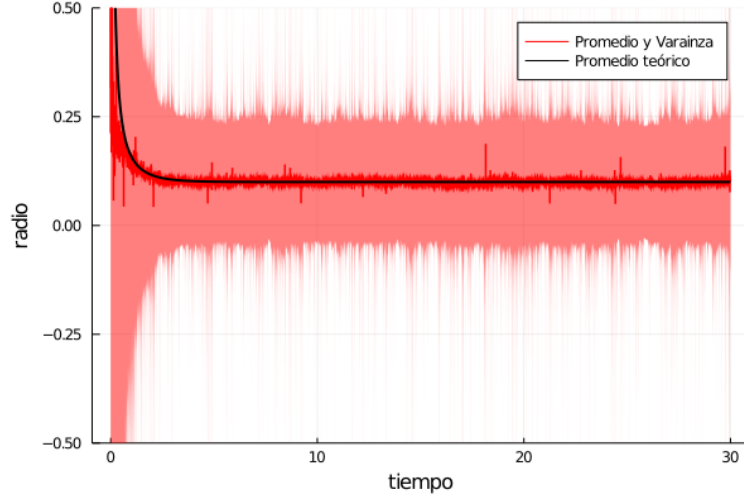


Figura 3.1: Gráfica del análisis de 5000 radios determinados por la ecuación $r_0 = \frac{\kappa}{\kappa^2 + \tau^2}$ obtenida en el apéndice C en función del tiempo t utilizando los procesos estocásticos para la curvatura (3.1.6) y la torsión (3.1.7). La curva negra es el promedio $\langle r_0 \rangle = \frac{\langle \kappa \rangle}{\langle \kappa \rangle^2 + \langle \tau \rangle^2}$ en cada instante de tiempo. La franja roja representa la raíz del desplazamiento cuadrático medio (o sus siglas en inglés RMSD). Y la línea roja oscura representa el promedio de 5000 radios. Los parámetros adimensionales para esta simulación fueron: $\langle \zeta \rangle = 3.0$, $\gamma = 1.0$ y $D'_\kappa = D'_\tau = 1.0$, con condiciones iniciales $\kappa'_0 = \tau'_0 = 0.01$.

y con ello escribimos las ecuaciones de Frenet-Serret en su forma discreta usando la exponencial a segundo orden para conservar la unitariedad de las rotaciones [13]

$$\begin{bmatrix} \hat{T} \\ \hat{N} \\ \hat{B} \end{bmatrix}_{n+1} = R_n \begin{bmatrix} \hat{T} \\ \hat{N} \\ \hat{B} \end{bmatrix}_n, \quad R_n = \exp(\Omega_n \Delta t) \approx \frac{1 + \frac{1}{2} \Omega_n \Delta t}{1 - \frac{1}{2} \Omega_n \Delta t}, \quad (3.1.13)$$

donde

$$\Omega_n = v \begin{bmatrix} 0 & \kappa_n & 0 \\ -\kappa_n & 0 & \tau_n \\ 0 & -\tau_n & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.1.14)$$

En el apéndice C analizamos las ecuaciones de Frenet-Serret en el caso donde la torsión y la curvatura son constantes, como consecuencia de esto se puede dar una expresión para el radio de las hélices que describe una partícula $r_0 = \frac{\kappa}{\kappa^2 + \tau^2}$ y con ello utilizar los valores del proceso de Ornstein-Uhlenbeck de las ecuaciones (3.1.6) y (3.1.7) para medir el radio que tendrán las hélices descritas por el proceso estocástico de Frenet-Serret en cada paso de tiempo, como se ve en la figura 3.1 donde se realizan 5000 trayectorias en las que se midió el radio que forman las hélices.

Por otro lado se puede demostrar que la matriz R_n , en la ecuación (3.1.13) es una rotación debido a que se evalúa una matriz antisimétrica en la exponencial [32], entonces sus eigenvalores son de la forma de $\{1, e^{-i\theta}, e^{i\theta}\}$ [33]. De la teoría de grupos sabemos que al multiplicar rotaciones el producto seguirá perteneciendo al conjunto de rotaciones.

Como vemos en la figura 3.2 (a) los eigenvalores de la matriz $\mathcal{R}_n = \prod_{i=0}^n R_i$ no son unitarios debido a que las matrices R_n son la exponencial a primer orden, es decir

$$R_n = \exp(\Omega_n \Delta t) \approx 1 + \Omega_n \Delta t, \quad (3.1.15)$$

por otro lado la figura 3.2 (b) los eigenvalores de la matriz $\mathcal{R}_n = \prod_{i=0}^n R_i$ son unitarios debido a que se usa la exponencial a segundo orden, dando así una mejor aproximación a $R_n = \exp(\Omega_n \Delta t)$.

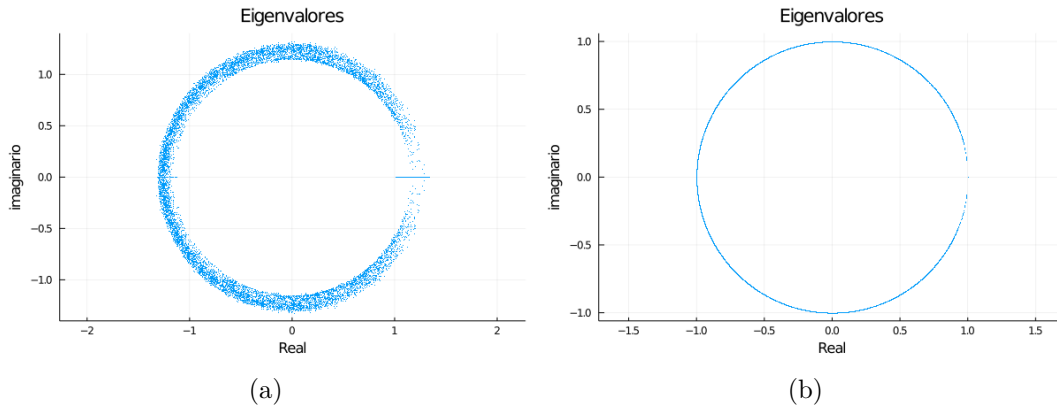


Figura 3.2: En ambas imágenes se muestran los eigenvalores de la matriz $\mathcal{R}_n = \prod_{i=0}^n R_i$ en el plano complejo. La matriz \mathcal{R}_n es el resultado de multiplicar desde R_0 hasta R_{30000} . Los parámetros adimensionales para esta simulación fueron: $\langle \zeta \rangle = 3.0$, $\gamma = 1.0$ y $D'_\kappa = D'_\tau = 1.0$, con condiciones iniciales $\kappa'_0 = \tau'_0 = 0.01$. (a) Son los eigenvalores en el tiempo 50.0 s con la aproximación a primer orden de R_n de la ecuación (3.1.16) donde no se conserva la unitariedad de los eigenvalores. (b) Los eigenvalores en el tiempo 50.0 s con aproximación a segundo orden de R_n de la ecuación (3.1.16) donde se conserva la unitariedad de los eigenvalores.

Finalmente la ecuación (3.1.13) se puede escribir de tal manera que solo se requiera de la triada de vectores inicial, y la triada n-ésima se determine por las demás matrices de rotación que dependen de la curvatura y torsión en el tiempo t_n . Adicionalmente usaremos la curvatura y torsión adimensionales de las ecuaciones (3.1.6) y (3.1.7), junto con el parametro temporal $\Delta t' = \gamma_\kappa \Delta t$ y velocidad $v' = \frac{\langle \kappa \rangle v}{\gamma_\kappa}$

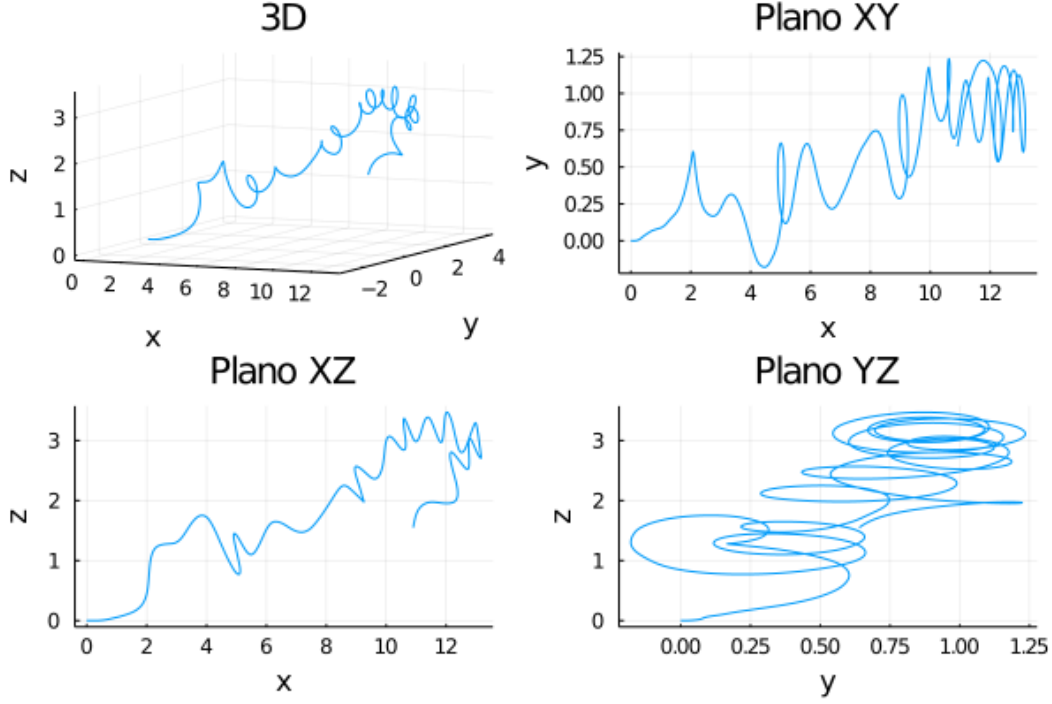


Figura 3.3: Trayectoria helicoidal generada con las ecuaciones discretizadas de Frenet-Serret (3.1.16) con constantes adimensionales: $\langle \zeta \rangle = 3.0$, $\gamma = 1.0$ y $D'_\kappa = D'_\tau = 1.0$.

adimensional.

$$\begin{bmatrix} \hat{T} \\ \hat{N} \\ \hat{B} \end{bmatrix}_n = R_{n-1} R_{n-2} \cdots R_1 R_0 \begin{bmatrix} \hat{T} \\ \hat{N} \\ \hat{B} \end{bmatrix}_0, \quad R_n = \frac{1 + \frac{1}{2} \Omega_n \Delta t'}{1 - \frac{1}{2} \Omega_n \Delta t'}, \quad (3.1.16)$$

donde

$$\Omega_n = v' \begin{bmatrix} 0 & \kappa'_n & 0 \\ -\kappa'_n & 0 & \tau'_n \\ 0 & -\tau'_n & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.1.17)$$

La rotación n -ésima es el resultado de multiplicar n -matrices de rotación y aplicar la condición inicial. Como el producto de rotaciones da como resultado otra rotación sabemos la forma de sus eigenvalores, entonces podemos estudiar la distribución de eigenfases y eigenejes de la matriz $\mathcal{R}_n = \prod_{i=0}^n R_i$, además de preguntarnos sobre como generar rotaciones aleatorias que describan las trayectorias de las ecuaciones de Frenet-Serret como se ve en la figura 3.3, que se generó usando la ecuación (3.1.16), es decir calculando el producto de matrices para obtener la triada de vectores $\{\hat{T}, \hat{N}, \hat{B}\}$ y usando la ecuación (3.1.9).

3.2. Ángulos y ejes de rotación asociados a R_n

En el campo de las matrices aleatorias, es común encontrar la distribución de los eigenvalores de los ensambles gaussianos o sus eigenfases en los ensambles circulares. Las matrices R_n que se generan en la ecuación (3.1.13) son rotaciones de 3 dimensiones por lo que sus eigenvalores son de la forma $\{1, e^{-i\theta}, e^{i\theta}\}$ [33], donde la interpretación geométrica de estos es que el valor 1 está asociado al eigenvector que es el eje de rotación, el cual denotaremos como eigeneje, y la eigenfase θ al ángulo que rota cualquier vector al rededor de dicho eje. En general todas las matrices de rotación tienen estas dos propiedades, por lo que en esta sección se analizará como construir matrices de rotación inducidas por los procesos estocásticos (3.1.2) y (3.1.3) que se obtiene de las ecuaciones de Frenet-Serret. Para ello escribiremos la matriz R_n de la ecuación (3.1.13) forma explicita, es decir:

$$R_n = \frac{1 + \frac{1}{2}\Omega_n\Delta t}{1 - \frac{1}{2}\Omega_n\Delta t} \approx \mathbb{1} + \Omega_n\Delta t + \Omega_n^2 \frac{\Delta t^2}{2} \quad (3.2.1)$$

$$= \begin{bmatrix} 1 - \frac{\kappa_n^2 v_a^2 \Delta t^2}{2} & \kappa_n v_a \Delta t & \frac{\kappa_n \tau_n v_a^2 \Delta t^2}{2} \\ -\kappa_n v_a \Delta t & 1 - \frac{\kappa_n^2 + \tau_n^2}{2} v_a^2 \Delta t^2 & \tau_n v_a \Delta t \\ \frac{\kappa_n \tau_n v_a^2 \Delta t^2}{2} & -\tau_n v_a \Delta t & 1 - \frac{\tau_n^2 v_a^2 \Delta t^2}{2} \end{bmatrix} \quad (3.2.2)$$

Utilizando la ecuación (3.2.2) podemos calcular los eigenvalores, considerando que $\Delta t^m \approx 0$ para $m \geq 3$. Obtenemos que el polinomio característico es

$$0 = \begin{vmatrix} 1 - \frac{\kappa_n^2 v_a^2 \Delta t^2}{2} - \lambda & \kappa_n v_a \Delta t & \frac{\kappa_n \tau_n v_a^2 \Delta t^2}{2} \\ -\kappa_n v_a \Delta t & 1 - \frac{\kappa_n^2 + \tau_n^2}{2} v_a^2 \Delta t^2 - \lambda & \tau_n v_a \Delta t \\ \frac{\kappa_n \tau_n v_a^2 \Delta t^2}{2} & -\tau_n v_a \Delta t & 1 - \frac{\tau_n^2 v_a^2 \Delta t^2}{2} - \lambda \end{vmatrix}, \quad (3.2.3)$$

$$0 = \lambda^3 + \lambda^2((\kappa_n^2 + \tau_n^2)v_a^2\Delta t^2 - 3) + \lambda(3 - (\kappa_n^2 + \tau_n^2)v_a^2\Delta t^2) - 1. \quad (3.2.4)$$

Dado que una de las raíces del polinomio es $\lambda_n^{(1)} = 1$ (el subíndice n denotará que pertenece a la n -ésima matriz R_n y el súper índice se usará para diferenciar los eigenvalores) entonces se puede factorizar

$$0 = (\lambda^2 + \lambda((\kappa_n^2 + \tau_n^2)v_a^2\Delta t^2 - 2) + 1)(\lambda - 1), \quad (3.2.5)$$

usando la formula general para polinomios de grado 2, podemos obtener los eigenvalores restantes

$$\lambda_n^{(2,3)} = 1 - \frac{(\kappa_n^2 + \tau_n^2)}{2} v_a^2 \Delta t^2 \pm i v_a \Delta t \sqrt{\kappa_n^2 + \tau_n^2}, \quad (3.2.6)$$

de aquí se puede obtener las eigenfases calculando su argumento, de modo que

$$\theta_n = \arctan \left(\frac{2v_a \Delta t \sqrt{\kappa_n^2 + \tau_n^2}}{2 - v_a^2 \Delta t^2 (\kappa_n^2 + \tau_n^2)} \right), \quad (3.2.7)$$

$$\theta_n = -\arctan \left(\frac{2v_a \Delta t \sqrt{\kappa_n^2 + \tau_n^2}}{2 - v_a^2 \Delta t^2 (\kappa_n^2 + \tau_n^2)} \right). \quad (3.2.8)$$

Si hacemos la serie de Taylor de la función dentro del arcotangente donde $x = \Delta t \sqrt{\kappa_n^2 + \tau_n^2}$ y recordando la hipótesis que $v_a \Delta t^m \approx 0$ para $m \geq 3$ podemos observar que

$$\frac{2v_a \Delta t \sqrt{\kappa_n^2 + \tau_n^2}}{2 - v_a^2 \Delta t^2 (\kappa_n^2 + \tau_n^2)} \approx v_a \Delta t \sqrt{\kappa_n^2 + \tau_n^2}, \quad (3.2.9)$$

entonces el ángulo se puede escribir como

$$\theta_n = \arctan \left(v_a \Delta t \sqrt{\kappa_n^2 + \tau_n^2} \right), \quad (3.2.10)$$

$$\theta_n = -\arctan \left(v_a \Delta t \sqrt{\kappa_n^2 + \tau_n^2} \right), \quad (3.2.11)$$

del mismo modo sabemos que la función arcotangente es la identidad para ángulos pequeños, entonces del mismo modo usando la serie de Taylor se puede justificar que la eigenfase de cada R_n es

$$\theta_n = v_a \Delta t \sqrt{\kappa_n^2 + \tau_n^2}, \quad (3.2.12)$$

$$\theta_n = -v_a \Delta t \sqrt{\kappa_n^2 + \tau_n^2}. \quad (3.2.13)$$

Si comparamos la forma explícita de las eigenfases (3.2.12) con el vector de Darboux (2.2.35), podemos notar que el ángulo de rotación en cada paso está determinado por la magnitud del vector de Darboux en cada paso

$$\theta_n = \Delta t \|\omega_n\|, \quad (3.2.14)$$

$$\theta_n = -\Delta t \|\omega_n\|. \quad (3.2.15)$$

Podemos observar que el vector de Darboux efectivamente es una velocidad angular.

Dado que se conocen los eigenvalores de las matrices R_n , se puede calcular del eigenaje, para ello se usa el eigenvalor $\lambda_n^{(1)} = 1$ en la ecuación (3.2.3) y resolver el siguiente sistema de ecuaciones

$$-\frac{\kappa_n^2 v_a^2 \Delta t^2}{2} x + v_a \Delta t \kappa_n y + \frac{\kappa_n \tau_n v_a^2 \Delta t^2}{2} z = 0, \quad (3.2.16)$$

$$-v_a \Delta t \kappa_n x - \frac{\kappa_n^2 + \tau_n^2}{2} v_a^2 \Delta t^2 y + v_a \Delta t \tau_n z = 0, \quad (3.2.17)$$

$$\frac{\kappa_n \tau_n v_a^2 \Delta t^2}{2} x - v_a \Delta t \tau_n y - \frac{\tau_n^2 v_a^2 \Delta t^2}{2} z = 0, \quad (3.2.18)$$

el cual se puede reducir a

$$-\kappa_n v_a \Delta t x + 2y + \tau_n v_a \Delta t z = 0, \quad (3.2.19)$$

$$-\kappa_n v_a \Delta t x - \frac{\kappa_n^2 + \tau_n^2}{2} v_a^2 \Delta t^2 y + \tau_n v_a \Delta t z = 0, \quad (3.2.20)$$

resolviendo se obtiene que

$$x = \frac{\tau}{\kappa} z_0, \quad (3.2.21)$$

$$y = 0, \quad (3.2.22)$$

$$z = z_0, \quad (3.2.23)$$

este vector podemos escogerlo unitario si hacemos que $z_0 = \frac{\kappa_n}{\sqrt{\tau_n^2 + \kappa_n^2}}$, esto nos deja como eigeneje

$$u_n = (u_n^x, u_n^y, u_n^z) = \left(\frac{\tau_n}{\sqrt{\tau_n^2 + \kappa_n^2}}, 0, \frac{\kappa_n}{\sqrt{\tau_n^2 + \kappa_n^2}} \right), \quad (3.2.24)$$

de rotación para cualquier matriz R_n . Del mismo modo que las eigenfases se pueden escribir en términos de la norma del vector de Darboux (2.2.35), obteniendo

$$u_n = \frac{v_a}{\|\omega_n\|} (\tau_n, 0, \kappa_n). \quad (3.2.25)$$

Este resultado es consistente ya que al ser un eje de rotación en un plano y estar relacionado con la velocidad angular determinada por el vector de Darboux que a su vez está en un plano determinado por la base de la triada de Frenet-Serret.

Como se puede observar el ángulo (3.2.12) y el eje de rotación (3.2.24) son estocásticos, dependientes de la distribución de κ y τ que está bien caracterizada ya que es un proceso de Ornstein-Uhlenbeck.

3.3. Matrices Aleatorias de Frenet-Serret

Ya que tenemos una expresión para de los ángulos θ_n y ejes de rotación u_n , dado por (3.2.13) y (3.2.24) respectivamente, de cada matriz R_n , se pueden construir los ángulos de rotación ψ_n y ejes w_n de las matrices asociadas a la matrices \mathcal{R}_n , dadas por

$$\mathcal{R}_n = \prod_{i=0}^n R_i, \quad (3.3.1)$$

utilizando los cuaterniones unitarios que están asociados a las matrices de rotación en tres dimensiones que se construyen con un eje unitario $\vec{v} = (v_x, v_y, v_z)$ y un ángulo ϕ de rotación arbitrarios

$$P = \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) + (v_x i + v_y j + v_z k) \sin\left(\frac{\phi}{2}\right), \quad (3.3.2)$$

como se había visto en el capítulo anterior. Escribimos el cuaternión P como un par ordenado

$$P = \left(\cos\left(\frac{\phi}{2}\right), \vec{v} \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \right), \quad (3.3.3)$$

y lo multiplicamos por el cuaternión Q con eje unitario $\vec{v}' = (v'_x, v'_y, v'_z)$ y ángulo de rotación ϕ' con la ecuación (2.4.12) para obtener otra rotación

$$QP = \left(\cos\left(\frac{\phi'}{2}\right), \vec{v}' \sin\left(\frac{\phi'}{2}\right) \right) \left(\cos\left(\frac{\phi}{2}\right), \vec{v} \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \right), \quad (3.3.4)$$

$$\begin{aligned} QP = & \left(\cos\left(\frac{\phi'}{2}\right) \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) - (\vec{v}' \cdot \vec{v}) \sin\left(\frac{\phi'}{2}\right) \sin\left(\frac{\phi}{2}\right), \cos\left(\frac{\phi'}{2}\right) \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \vec{v}' + \right. \\ & \left. + \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) \sin\left(\frac{\phi'}{2}\right) \vec{v} + \sin\left(\frac{\phi'}{2}\right) \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \vec{v}' \times \vec{v} \right). \end{aligned} \quad (3.3.5)$$

El cuaternión QP debe poder escribirse como (3.3.2), es decir en términos de un ángulo y un vector unitario dependiente de los ángulos y ejes de P y Q .

Si identificamos a Q como una matriz R_n y a P como una matriz \mathcal{R}_{n-1} de la ecuación (3.3.1), podemos reescribir a ϕ' como la eigenfase θ_n , y a \vec{v}' como el eigeneje u_n que son componentes de la rotación en el tiempo $n\Delta t'$ (se puede interpretar como rotaciones infinitesimales); sustituir a ϕ como el ángulo de rotación ψ_{n-1} y a \vec{v} como el eje de rotación w_{n-1} que describen la dinámica de la triada de vectores de Frenet-Serret desde la condición inicial hasta el tiempo $n\Delta t'$; de tal manera que podemos obtener la siguiente expresión recursiva para obtener todos los ángulos y ejes de rotación que se generan por las ecuaciones de Frenet-Serret estocásticas,

dicha expresión escrita como:

$$\psi_n = 2\arccos \left[\cos \left(\frac{\theta_n}{2} \right) \cos \left(\frac{\psi_{n-1}}{2} \right) - \sin \left(\frac{\theta_n}{2} \right) \sin \left(\frac{\psi_{n-1}}{2} \right) (u_n \cdot w_{n-1}) \right], \quad (3.3.6)$$

$$w_n^x = \left[\cos \left(\frac{\theta_n}{2} \right) \sin \left(\frac{\psi_{n-1}}{2} \right) w_{n-1}^x + \cos \left(\frac{\psi_{n-1}}{2} \right) \sin \left(\frac{\theta_n}{2} \right) u_n^x + \right. \\ \left. - (w_{n-1}^y u_n^z) \sin \left(\frac{\psi_{n-1}}{2} \right) \sin \left(\frac{\theta_n}{2} \right) \right] \csc \left(\frac{\psi_n}{2} \right), \quad (3.3.7)$$

$$w_n^y = \left[\cos \left(\frac{\theta_n}{2} \right) \sin \left(\frac{\psi_{n-1}}{2} \right) w_{n-1}^y + (u_n^z w_{n-1}^x - w_{n-1}^z u_n^x) \times \right. \\ \left. \times \sin \left(\frac{\psi_{n-1}}{2} \right) \sin \left(\frac{\theta_n}{2} \right) \right] \csc \left(\frac{\psi_n}{2} \right), \quad (3.3.8)$$

$$w_n^z = \left[\cos \left(\frac{\theta_n}{2} \right) \sin \left(\frac{\psi_{n-1}}{2} \right) w_{n-1}^z + \cos \left(\frac{\psi_{n-1}}{2} \right) \sin \left(\frac{\theta_n}{2} \right) u_n^z + \right. \\ \left. + (w_{n-1}^y u_n^x) \sin \left(\frac{\psi_{n-1}}{2} \right) \sin \left(\frac{\theta_n}{2} \right) \right] \csc \left(\frac{\psi_n}{2} \right). \quad (3.3.9)$$

Utilizando estos ángulos ψ_n y ejes w_n , que son parte del cuaternion QP de rotación, construimos las matrices \mathcal{R}_n del ensamble de cada paso de la trayectoria de las ecuaciones Frenet-Serret con la matriz de rotación para un eje y ángulo arbitrario. Recordemos que la función $\sin \psi_n$ y $\cos \psi_n$ se escribirán como $s\psi_n$ y $c\psi_n$ respectivamente,

$$\begin{bmatrix} c\psi_n + (w_n^x)^2 (1 - c\psi_n) & w_n^x w_n^y (1 - c\psi_n) - w_n^z s\psi_n \\ w_n^y w_n^x (1 - c\psi_n) + w_n^z s\psi_n & c\psi_n + (w_n^y)^2 (1 - c\psi_n) \\ w_n^z w_n^x (1 - c\psi_n) - w_n^y s\psi_n & w_n^z w_n^y (1 - c\psi_n) + w_n^x s\psi_n \\ w_n^x w_n^z (1 - c\psi_n) + w_n^y s\psi_n \\ w_n^y w_n^z (1 - c\psi_n) - w_n^x s\psi_n \\ c\psi_n + (w_n^z)^2 (1 - c\psi_n) \end{bmatrix}. \quad (3.3.10)$$

El proceso de construir esta matriz nos proporciona un algoritmo para crear matrices aleatorias \mathcal{R}_n dependientes de las anteriores para describir la dinámica de la triada de vectores tangente \hat{T} , normal \hat{N} y binormal \hat{B} , cuya descripción nos permite conocer las trayectorias que se obtienen de las ecuaciones de Frenet-Serret de manera discreta.

Como se ha mencionado anteriormente cada matriz \mathcal{R}_n representada por (3.3.10) está asociada a eigenfases ψ_n y eigenejes $w_n = (w_n^x, w_n^y, w_n^z)$ los cuales son difíciles de calcular analíticamente al igual que sus propiedades estadísticas sin embargo se

pueden hacer simulaciones numéricas con el método de los cuaterniones con menor tiempo de cálculo computacional. También obtenemos una nueva forma de generar matrices aleatorias del grupo $SO(3)$.

En las figuras 3.4 se muestran la distribución de las componentes w_n^x , w_n^y y w_n^z de eigenejes w_n así como su representación en la esfera unitaria. Notamos que los ejes de rotación se concentran en dos polos característicos en diferentes momentos, estas acumulaciones se intercambian a lo largo del tiempo hasta que se distribuye uniformemente en la esfera unitaria, la razón de ello es que los eigenejes están determinados por la función $\sin(x)$ y $\cos(x)$, los detalles de esto están en el apéndice D. Similarmente sucede con las distribuciones de las eigenfases. En las figuras 3.5 podemos notar que los ángulos de rotación se concentran cerca del 0 hasta llegar a π en poco tiempo, comparado con el tiempo que tardan los eigenejes en cambiar de polo, finalmente empiezan a tener una distribución tal que las eigenfases más probables son las más grandes.

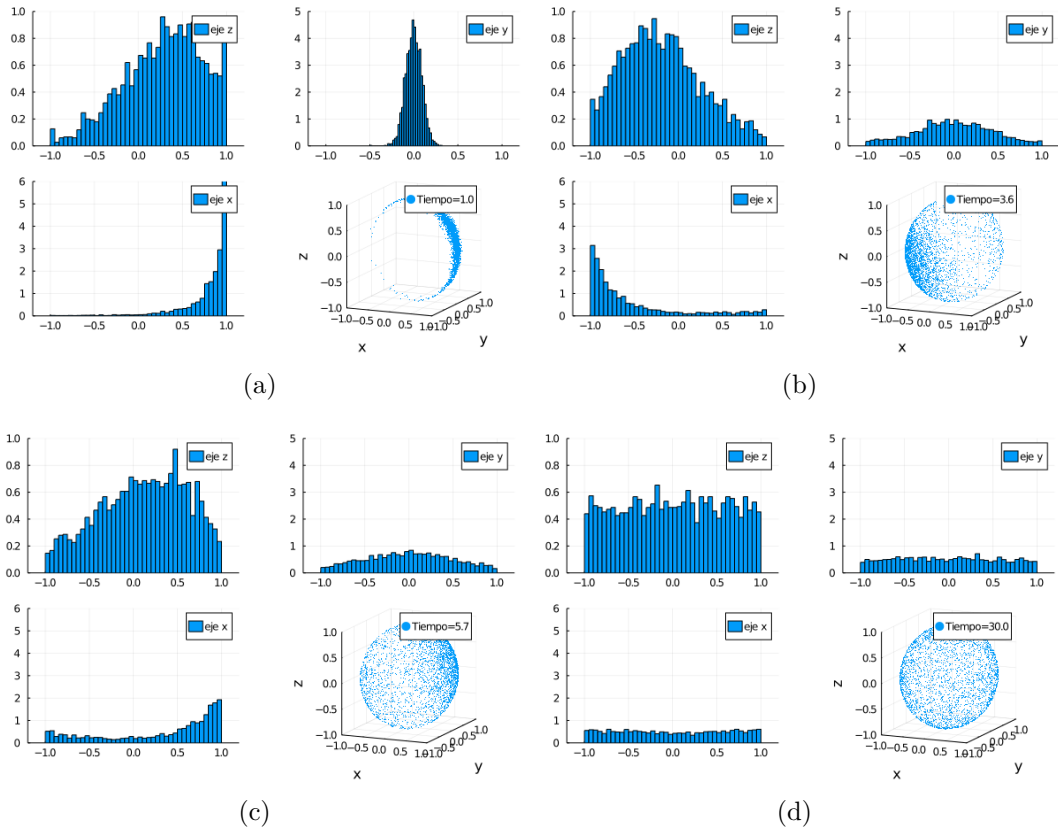


Figura 3.4: Cada imagen está compuesta por cuatro imágenes que en orden de izquierda a derecha y de arriba a abajo, la primera imagen representa el histograma a la entrada del eje w_n^x , la segunda imagen la entrada w_n^y , la tercera la componente w_n^z y la última imagen la representación de un ensamble de ejes de rotación en la esfera unitaria en un tiempo dado. Los parámetros adimensionales para esta simulación fueron: $\langle \zeta \rangle = 3.0$, $\gamma = 1.0$ y $D'_\kappa = D'_\tau = 1.0$, con condiciones iniciales $\kappa'_0 = \tau'_0 = 0.01$. (a) Son los eigenejes en el tiempo 1.0. (b) Son los eigenejes en el tiempo 3.6. (c) Son los eigenejes en el tiempo 5.7. (d) Son los eigenejes en el tiempo 30.0. Para cada simulación se hicieron 9000 realizaciones.

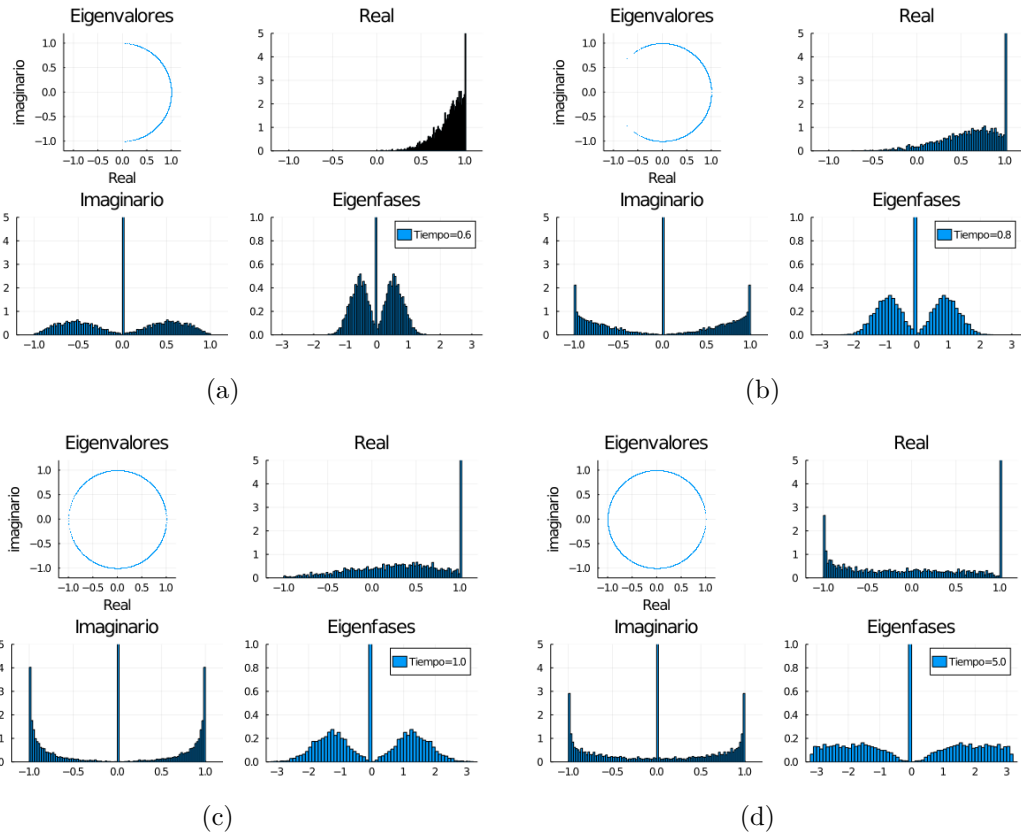


Figura 3.5: Cada imagen está compuesta por cuatro imágenes que en orden de izquierda a derecha y de arriba a abajo, la primera imagen representa los eigenvalores en el plano complejo asociados a las eigenfases ψ_n , $-\psi_n$ y el eigenvalor 1, la segunda imagen el histograma de la parte real, la tercera el histograma la parte imaginaria y la última imagen el histograma de eigenfases ψ_n , $-\psi_n$ en un tiempo dado. Los parámetros adimensionales para esta simulación fueron: $\langle \zeta \rangle = 3.0$, $\gamma = 1.0$ y $D'_\kappa = D'_\tau = 1.0$, con condiciones iniciales $\kappa'_0 = \tau'_0 = 0.01$. (a) Son los eigenvalores en el tiempo 0.6. (b) Son los eigenvalores en el tiempo 0.8. (c) son los eigenvalores en el tiempo 1.0. (d) Son los eigenvalores en el tiempo 5.0. Para cada simulación se hicieron 9000 realizaciones.

Conclusiones

Se estableció una conexión entre la teoría de matrices aleatorias y las ecuaciones estocásticas de Frenet-Serret a través de las propiedades estadísticas de la curvatura y la torsión, adicionalmente usando la relación que existe entre los cuaterniones unitarios y las rotaciones se logró diseñar e implementar un algoritmo eficiente para generar matrices aleatorias pertenecientes al grupo $SO(3)$ que describen la dinámica de la triada inicial de vectores tangente, normal y binormal, con ellos se logra simular movimiento activo helicoidal.

Utilizando el algoritmo para generar matrices aleatorias con cuaterniones, y con ello trazar una trayectoria helicoidal, se obtuvo un tiempo de computo promedio de 74.415 ms, en contraste al método usual de multiplicar matrices, como se describe en la ecuación (3.1.16) donde se obtuvo un tiempo de computo promedio de 427.519 ms, los tiempos fueron medidos con la paquetería BenchmarkTools de Julia. En ambos casos se hicieron 20000 pasos de tiempo para generar la trayectoria de la figura 3.3 con los mismos parámetros. Para corroborar que el nuevo método es correcto se replicaron los resultados de las figuras 3.4 y 3.5 que muestran los eigenejes w_n y eigenfases ψ_n de las matrices \mathcal{R}_n .

El algoritmo o programa realizado para calcular matrices que describen la trayectoria de una partícula helicoidal, también proporciona un método para generar matrices aleatorias que pertenecen al ensamble real circular o en sus siglas en inglés CRE, pero no tiene una distribución uniforme en sus eigenfases por lo que podemos decir que es un subconjunto del CRE que puede modelar la trayectoria helicoidal de una partícula activa.

Al tratarse de una serie de tiempo de matrices aleatorias \mathcal{R}_n podemos obtener características a partir de sus eigenvectores w_n y eigenfases ψ_n que a su vez son también series de tiempo.

En el caso de los eigenejes podemos calcular numéricamente el coseno del ángulo que hay entre un eigeneje de referencia w_{n_0} y un eigeneje en cualquier otro instante de tiempo w_n donde $n_0 < n$. Los resultados los podemos interpretar con lo explicado en el apéndice D. En el caso donde la curvatura y la torsión son determinadas y constantes obtenemos que el eigeneje oscila entre $(\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, \frac{1}{\sqrt{2}})$ y $(-\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, \frac{1}{\sqrt{2}})$ por lo que el coseno del ángulo entre el primer vector y los demás oscilará entre 1 y -1 pues son paralelos y antiparalelos. Sin embargo cuando la constante de difusión D'_κ y D'_τ son valores lo suficientemente grandes, el coseno del ángulo entre los eigenejes es cero en promedio, como se observa en la figura 4.1(b), es decir tienden a ser perpendiculares entre ellos. Por otro lado cuando la constante de difusión cada vez es menor se recuperan las oscilaciones entre 1 y -1 , es decir se vuelve cada vez más determinista. Si la constante de decaimiento γ crece, la oscilación entre ejes paralelos y antiparalelos decrece en menor tiempo, por el contrario, cuando la constante de amortiguamiento tiene valores más cercanos al cero, este decaimiento es más rápido (ver figura 4.1(a)).

En caso de las eigenfases podemos obtener la covarianza que hay entre un ángulo de rotación fijo ψ_{n_0} y otro ψ_n de la misma manera como se escogieron los eigenejes. Este cálculo nos muestra que tan correlacionadas están las variables linealmente donde si es positiva es una correlación positiva y negativa una negativa, es decir si una variable aumenta la otra disminuye. En la figura 4.1 (d) podemos notar que mientras crece la constante de difusión, la correlación entre una eigenfase y las siguientes decaen más rápido, hasta que en promedio no hay correlación alguna entre ellas. Los resultados de fijar la constantes de difusión y se varía la constante de amortiguamiento son similares (ver figura 4.1(c)), si decrece la constante de amortiguamiento, hay un decaimiento de la correlación hasta ser cercano a cero, por otro lado si crece la constante de amortiguamiento no hay un decaimiento y en todo momento la correlación es cercana a cero. Esto sugiere que no existe relación alguna dependencia entre los ángulos en la serie de tiempo.

Como se explica en el apéndice D las oscilaciones que se describen en las figuras 3.5 y 3.4 se deben a la construcción de los ejes y ángulos de rotación con los cuaterniones, sin embargo son rotaciones equivalentes al método convencional de multiplicar matrices generadas por la curvatura y la torsión como se hace notar en el apéndice antes mencionado. Esto nos da una conexión con un subconjunto de las matrices aleatorias CRE, más aun una relación entre el movimiento helicoidal activo y las matrices aleatorias. Esto puede desarrollarse a más pues las matrices de Frenet-Serret ya que pueden generalizarse a más dimensiones, lo que puede permitir generar trayectorias helicoidales en otras dimensiones, sin embargo se tendría

que emplear otro método además de los cuaterniones ya que ese solo sirve para tres dimensiones. Por otro lado, con la disminución de tiempo de calculo computacional se podría simular un ensamble de materia activa helicoidal con interacción.

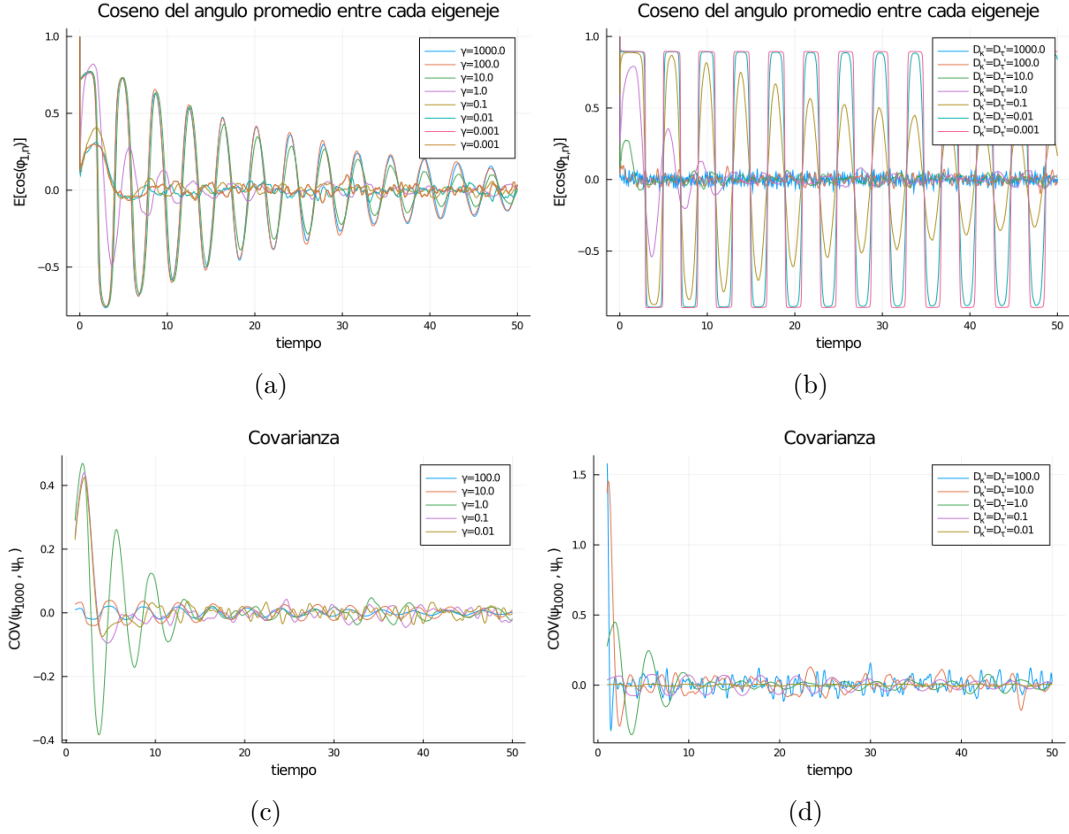


Figura 4.1: Las gráficas (a) y (b) es el promedio del coseno del ángulo que hay entre un eigeneje de referencia, en este caso el primero w_1 , y cualquier otro en otro instante de tiempo adelante w_n . Las gráficas (c) y (d) es la covarianza normalizada entre la eigenfase en el segundo 1 ψ_{1000} y en cualquier otro instante de tiempo ψ_n . En las gráficas (a) y (c) se varía el parámetro de amortiguamiento γ , y en las gráficas (b) y (d) se varía las constantes de difusión D'_κ y D'_τ . Los parámetros adimensionales para estas medidas fueron: $\langle \zeta \rangle = 3.0$, $\kappa'_0 = \tau'_0 = 1.0$, con valores fijos de $D'_\kappa = D'_\tau = 1.0$ para las gráficas (a) y (c), y valores fijos de $\gamma = 1.0$ para las gráficas (b) y (d). Para cada gráfica se hicieron 500 realizaciones.

Cálculo de la expresión $\langle \xi(t)\delta(x - X_t) \rangle_\xi$

El Teorema de Novikov que establece que para cualquier proceso estocástico gaussiano con promedio cero y para cualquier funcional del proceso gaussiano se tiene que[19]

$$\langle \xi(t)\mathcal{F}[\xi(t)] \rangle_\xi = \int_0^t \langle \xi(t)\xi(s) \rangle_\xi \left\langle \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \xi(s)} \right\rangle_\xi ds. \quad (\text{A.0.1})$$

Para nuestro caso sabemos que la covarianza del ruido blanco es $\langle \xi(s)\xi(s) \rangle = 2\Gamma\delta(t-s)$ además que en la derivada funcional podemos usar la regla de la cadena, entonces

$$\langle \xi(t)\delta(x - X_t) \rangle_\xi = \int_0^t \langle \xi(t)\xi(s) \rangle_\xi \left\langle \frac{\delta}{\delta \xi(s)} \delta(x - X_t) \right\rangle_\xi ds, \quad (\text{A.0.2})$$

$$\langle \xi(t)\delta(x - X_t) \rangle_\xi = \int_0^t 2\Gamma\delta(t-s) \left\langle \frac{\delta X_t}{\delta \xi(s)} \frac{\delta}{\delta X_t} \delta(x - X_t) \right\rangle_\xi ds, \quad (\text{A.0.3})$$

$$\langle \xi(t)\delta(x - X_t) \rangle_\xi = \Gamma \left\langle \frac{\delta X_t}{\delta \xi(s)} \frac{\delta}{\delta X_t} \delta(x - X_t) \Big|_{s=t} \right\rangle_\xi, \quad (\text{A.0.4})$$

Para justificar el paso anterior es necesario considerar la siguiente integral donde $a \leq x_0 \leq b$ y por las propiedades de la integral puede escribirse como la suma de dos integrales

$$\int_a^b f(x)\delta(x - x_0)dx = \int_a^{x_0} f(x)\delta(x - x_0)dx + \int_{x_0}^b f(x)\delta(x - x_0)dx. \quad (\text{A.0.5})$$

Del primer termino de la parte izquierda de la igualdad tenemos que es igual a $f(x_0)$ pues x_0 está entre a y b . Estrictamente pasaría lo mismo con los términos de

la parte derecha de la igualdad pues x_0 pertenece al intervalo $[a, x_0]$ y del mismo modo pertenece a $[x_0, b]$ por lo que tendríamos la siguiente igualdad

$$f(x_0) = f(x_0) + f(x_0), \quad (\text{A.0.6})$$

claramente esto no es correcto, para arreglar esto, podemos definir lo siguiente si $x_0 = a$ o $x_0 = b$

$$\int_a^b f(x)\delta(x - x_0)dx = \frac{1}{2}f(x_0), \quad (\text{A.0.7})$$

si lo definimos así hay consistencia en la ecuación (A.0.6).

Continuando con la ecuación (A.0.4) hay que calcular la derivada funcional de X_t con respecto a $\xi(s)$ evaluada en t

$$\left. \frac{\delta X_t}{\delta \xi(s)} \right|_{s=t} = \frac{\delta}{\delta \xi(s)} \left(x_0 e^{-\gamma t} + \mu_0(1 - e^{-\gamma t}) + \int_0^t \xi(s) e^{-\gamma(t-s)} ds \right), \quad (\text{A.0.8})$$

$$\left. \frac{\delta X_t}{\delta \xi(s)} \right|_{s=t} = e^{-\gamma(t-t)} = 1, \quad (\text{A.0.9})$$

con este resultado y recordando la expresión para la función de densidad de probabilidad (2.1.9) reescribimos la ecuación (A.0.4) haciendo notar que $-\frac{\partial}{\partial x}\delta(x - X_t) = \frac{\partial}{\partial X_t}\delta(x - X_t)$,

$$\langle \xi(t)\delta(x - X_t) \rangle_\xi = \Gamma \left\langle \frac{\delta}{\delta X_t} \delta(x - X_t) \right\rangle_\xi, \quad (\text{A.0.10})$$

$$\langle \xi(t)\delta(x - X_t) \rangle_\xi = -\Gamma \frac{\partial}{\partial x} \left\langle \delta(x - X_t) \right\rangle_\xi, \quad (\text{A.0.11})$$

$$\langle \xi(t)\delta(x - X_t) \rangle_\xi = -\Gamma \frac{\partial}{\partial x} P(x, t). \quad (\text{A.0.12})$$

Solución de la ecuación de Fokker-Planck para el proceso de Ornstein–Uhlenbeck

La ecuación (2.1.22) puede verse en el espacio de Fourier como

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} = \Gamma(ik)^2 \mathcal{P} + \mathcal{F} \left[\gamma(x - \mu_0) \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial x} \right] + \gamma \mathcal{P}, \quad (\text{B.0.1})$$

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} = -\Gamma k^2 \mathcal{P} + \frac{\gamma}{\sqrt{2\pi}} \mathcal{F} \left[(x - \mu_0) \right] * \mathcal{F} \left[\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial x} \right] + \gamma \mathcal{P}, \quad (\text{B.0.2})$$

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} = -\Gamma k^2 \mathcal{P} + \frac{\gamma}{\sqrt{2\pi}} \left[i\sqrt{2\pi} \delta'(k) - \mu_0 \sqrt{2\pi} \delta(k) \right] * \left[ik \mathcal{P} \right] + \gamma \mathcal{P}, \quad (\text{B.0.3})$$

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} = -\Gamma k^2 \mathcal{P} + \gamma \left[i\delta'(k) - \mu_0 \delta(k) \right] * \left[ik \mathcal{P} \right] + \gamma \mathcal{P}, \quad (\text{B.0.4})$$

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} = -\Gamma k^2 \mathcal{P} + \gamma \left[i\delta'(k) * ik \mathcal{P} - \mu_0 \delta(k) * ik \mathcal{P} \right] + \gamma \mathcal{P}, \quad (\text{B.0.5})$$

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} = -\Gamma k^2 \mathcal{P} + \gamma \left[-\frac{\partial}{\partial k} (k \mathcal{P}) - \mu_0 ik \mathcal{P} \right] + \gamma \mathcal{P}, \quad (\text{B.0.6})$$

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} = -\Gamma k^2 \mathcal{P} - \gamma \mathcal{P} - \gamma k \frac{\partial}{\partial k} \mathcal{P} - \gamma \mu_0 ik \mathcal{P} + \gamma \mathcal{P}, \quad (\text{B.0.7})$$

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} = -\Gamma k^2 \mathcal{P} - \gamma k \frac{\partial}{\partial k} \mathcal{P} - \gamma \mu_0 ik \mathcal{P}, \quad (\text{B.0.8})$$

se obtiene una ecuación diferencial parcial de primer orden que se puede resolver por el método de las características pues tenemos que la condición inicial en el espacio de Fourier es $\mathcal{P}(k, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ix_0 k}$, para mayor comodidad se puede escribir de esta

APÉNDICE B. SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE FOKKER-PLANCK
PARA EL PROCESO DE ORNSTEIN–UHLENBECK

forma

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} + \gamma k \frac{\partial}{\partial k} \mathcal{P} = -(\Gamma k^2 \mathcal{P} + \gamma \mu_0 i k \mathcal{P}). \quad (\text{B.0.9})$$

El método consiste en pensar que hay una curva característica descrita por un parámetro s con las funciones $k(s), t(s)$ y $\mathcal{P}(s)$ y una superficie parametrizada por s y τ que es solución de la ecuación diferencial parcial, con las funciones $k(s, \tau), t(s, \tau)$ y $\mathcal{P}(s, \tau)$. La curva característica puede escribirse como las condiciones iniciales, es decir que

$$k(s, 0) = k(s) = s, \quad (\text{B.0.10})$$

$$t(s, 0) = t(s) = 0, \quad (\text{B.0.11})$$

$$\mathcal{P}(s, 0) = \mathcal{P}(s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ix_0 s}. \quad (\text{B.0.12})$$

Con esto sabemos que la solución depende también de los nuevos parámetros $\mathcal{P} = \mathcal{P}(k(s, \tau), t(s, \tau))$, por lo que podemos calcular la derivada total de la función \mathcal{P} con respecto a τ

$$\frac{d\mathcal{P}}{d\tau} = \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial k} \frac{dk}{d\tau} + \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} \frac{dt}{d\tau}. \quad (\text{B.0.13})$$

Si comparamos la ecuación anterior con la ecuación (B.0.9) podemos escribir el siguiente sistema de ecuaciones que se conoce como ecuaciones de Lagrange-Charpit

$$\frac{dk}{d\tau} = \gamma k, \quad (\text{B.0.14})$$

$$\frac{dt}{d\tau} = 1, \quad (\text{B.0.15})$$

$$\frac{d\mathcal{P}}{d\tau} = -(\Gamma k^2 + \gamma \mu_0 i k) \mathcal{P}, \quad (\text{B.0.16})$$

las cuales podemos escribir de la forma

$$\frac{d\mathcal{P}}{-(\Gamma k^2 + \gamma \mu_0 i k) \mathcal{P}} = \frac{dk}{\gamma k} = \frac{dt}{1}, \quad (\text{B.0.17})$$

el teorema del método de Lagrange-Charpit nos asegura que las soluciones de estas ecuaciones $\Phi(\mathcal{P}, k, t)$ y $\Psi(\mathcal{P}, k, t)$ son constantes, forman parte de una función arbitraria que es solución de la ecuación diferencial parcial $f(\Phi, \Psi) = 0$ [34, 35]. Entonces resolviendo la primera igualdad (primer y segundo termino) y la segunda igualdad (segundo y tercer termino), se obtiene que

$$C_1 = \Phi(\mathcal{P}, k, t) = \mathcal{P} \exp\left(\frac{\Gamma k^2}{2\gamma} + i\mu_0 k\right), \quad (\text{B.0.18})$$

$$C_2 = \Psi(\mathcal{P}, k, t) = k \exp(-\gamma t). \quad (\text{B.0.19})$$

Como la función solución $f(\Phi, \Psi) = 0$ es arbitraria se puede escribir como $\Phi - g(\Psi) = 0$, entonces sustituyendo

$$\mathcal{P} \exp \left(\frac{\Gamma k^2}{2\gamma} + i\mu_0 k \right) - g(ke^{-\gamma t}) = 0, \quad (\text{B.0.20})$$

$$\mathcal{P}(k, t) = \exp \left(- \left[\frac{\Gamma k^2}{2\gamma} + i\mu_0 k \right] \right) g(ke^{-\gamma t}), \quad (\text{B.0.21})$$

se puede usar la condición inicial $\mathcal{P}(k, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ix_0 k}$ para saber quien es g ,

$$\mathcal{P}(k, 0) = \exp \left(- \left[\frac{\Gamma k^2}{2\gamma} + i\mu_0 k \right] \right) g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ix_0 k}, \quad (\text{B.0.22})$$

entonces la función g es

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp \left(\frac{\Gamma k^2}{2\gamma} + i\mu_0 k - ix_0 k \right), \quad (\text{B.0.23})$$

$$g(ke^{-\gamma t}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp \left(\frac{\Gamma k^2 e^{-\gamma 2t}}{2\gamma} + i\mu_0 k e^{-\gamma t} - ix_0 k e^{-\gamma t} \right), \quad (\text{B.0.24})$$

por tanto la solución de la ecuación diferencial parcial en el espacio de Fourier (B.0.9) es

$$\mathcal{P}(k, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[- \frac{\Gamma k^2}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}) \right] \exp \left[-ik (\mu_0 + (x_0 - \mu_0) e^{-\gamma t}) \right]. \quad (\text{B.0.25})$$

Solución de las ecuaciones de Frenet-Serret para hélices

Se pueden obtener la ecuación paramétrica de la curva $\vec{\mathbf{r}}(t)$ descrita por las ecuaciones de Frenet-Serret (2.2.17) con curvatura κ y torsión τ constantes, por simplicidad se puede escoger la velocidad v constante.

Derivando dos veces la ecuación (2.2.17a), obtenemos

$$\frac{d^3 \hat{T}}{dt^3} = v\kappa \frac{d^2 \hat{N}}{dt^2}. \quad (\text{C.0.1})$$

Por otro lado si derivamos la ecuación (2.2.17b) tenemos una expresión para la segunda derivada del vector normal

$$\frac{d^2 \hat{N}}{dt^2} = -v\kappa \frac{d\hat{T}}{dt} + v\tau \frac{d\hat{B}}{dt}. \quad (\text{C.0.2})$$

La derivada del vector binormal se puede sustituir de la ecuación (2.2.17c) para obtener una ecuación en términos de los vectores normal y tangente

$$\frac{d^2 \hat{N}}{dt^2} = -v\kappa \frac{d\hat{T}}{dt} - v^2 \tau^2 \hat{N}, \quad (\text{C.0.3})$$

pero de la ecuación (2.2.17a) sabemos que el vector normal está relacionado con la derivada del vector tangente, entonces obtenemos que

$$\frac{d^2 \hat{N}}{dt^2} = -v\kappa \frac{d\hat{T}}{dt} - \frac{v\tau^2}{\kappa} \frac{d\hat{T}}{dt}. \quad (\text{C.0.4})$$

Con ello podemos sustituir la ecuación (C.0.4) en la ecuación (C.0.1) para obtener una ecuación diferencial de la tangente

$$\frac{d^3\hat{T}}{dt^3} = -v^2(\kappa^2 + \tau^2)\frac{d\hat{T}}{dt}, \quad (\text{C.0.5})$$

y recordando que la derivada de la posición es la magnitud de la velocidad por la tangente

$$\frac{d}{dt}\vec{\mathbf{r}} = v\hat{T}, \quad (\text{C.0.6})$$

entonces escribiendo como $v^2(\kappa^2 + \tau^2) = \frac{1}{c^2}$ podemos obtener una ecuación diferencial para $\vec{\mathbf{r}}$ escrita como

$$\frac{d^4}{dt^4}\vec{\mathbf{r}} + \frac{1}{c^2}\frac{d^2}{dt^2}\vec{\mathbf{r}} = 0, \quad (\text{C.0.7})$$

cuya solución está dada por

$$\vec{\mathbf{r}}(t) = \mathbf{A} + \mathbf{B}t + \mathbf{C}\cos\left(\frac{t}{c}\right) + \mathbf{D}\sin\left(\frac{t}{c}\right), \quad (\text{C.0.8})$$

donde \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} y \mathbf{D} son constantes determinadas por las condiciones iniciales. Podemos escogerlas de modo que

$$\vec{\mathbf{r}}(0) = (r_0, 0, 0), \quad (\text{C.0.9})$$

$$\frac{d}{dt}\vec{\mathbf{r}}(0) = \left(0, \frac{r_0}{c}, h\right), \quad (\text{C.0.10})$$

$$\frac{d^2}{dt^2}\vec{\mathbf{r}}(0) = \left(-\frac{r_0}{c^2}, 0, 0\right), \quad (\text{C.0.11})$$

$$\frac{d^3}{dt^3}\vec{\mathbf{r}}(0) = \left(0, -\frac{r_0}{c^3}, 0\right), \quad (\text{C.0.12})$$

así tenemos que la curva son hélices descritas por

$$\vec{\mathbf{r}}(t) = \left(r_0\cos\left(\frac{t}{c}\right), r_0\sin\left(\frac{t}{c}\right), ht\right). \quad (\text{C.0.13})$$

De la ecuación (C.0.13) se puede notar que el radio es $r_0 = \frac{\kappa}{\kappa^2 + \tau^2}$, la distancia que separa a cada espira es $h = \frac{\tau}{\kappa^2 + \tau^2}$ y el ángulo de la hélice es $\theta_0 = \tan^{-1}\left(\frac{h}{r_0}\right)$. Esto permite definir un sistema de referencia con respecto al eje como

$$\mathbf{R} = \vec{\mathbf{r}} + r_0\hat{N}, \quad (\text{C.0.14})$$

$$h_1 = \sin\theta_0\hat{T} + \cos\theta_0\hat{B}, \quad (\text{C.0.15})$$

$$h_2 = -\hat{N}, \quad (\text{C.0.16})$$

$$h_3 = h_1 \times h_2. \quad (\text{C.0.17})$$

Con este nuevo sistema y de la ecuación (C.0.13) se puede notar que para curvatura y torsión constantes las ecuaciones de Frenet-Serret modelan hélices[11].

Eigenfases y eigenejes de las matrices \mathcal{R}_n con curvatura y torsión constantes

Podemos identificar a $\mathcal{R}_n = \mathcal{R}(t)$ como la matriz descrita en la ecuación (3.1.11)

$$\mathcal{R}(t) = \exp\left(\int_0^t \Omega dt'\right), \quad \Omega = v_a \begin{bmatrix} 0 & \kappa(t') & 0 \\ -\kappa(t') & 0 & \tau(t') \\ 0 & -\tau(t') & 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{D.0.1})$$

Si suponemos que la curvatura y la torsión son constantes e iguales (por simplicidad) $\kappa(t') = \tau(t') = \kappa_o$ podemos observar que la exponencial de la matriz resultante de integrar Ω se puede reescribir como

$$\mathcal{R}(t) = \exp\left(v_a \kappa_o t \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}\right) \quad (\text{D.0.2})$$

$$= \begin{bmatrix} \cos^2\left(\frac{v_a \kappa_o t}{\sqrt{2}}\right) & \frac{\sin(\sqrt{2}v_a \kappa_o t)}{\sqrt{2}} & \sin^2\left(\frac{v_a \kappa_o t}{\sqrt{2}}\right) \\ -\frac{\sin(\sqrt{2}v_a \kappa_o t)}{\sqrt{2}} & \cos(\sqrt{2}v_a \kappa_o t) & \frac{\sin(\sqrt{2}v_a \kappa_o t)}{\sqrt{2}} \\ \sin^2\left(\frac{v_a \kappa_o t}{\sqrt{2}}\right) & -\frac{\sin(\sqrt{2}v_a \kappa_o t)}{\sqrt{2}} & \cos^2\left(\frac{v_a \kappa_o t}{\sqrt{2}}\right) \end{bmatrix}, \quad (\text{D.0.3})$$

con ello tenemos una expresión que se puede usar para obtener las eigenfases y eigenjees en cada instante de tiempo. Para ello se calcula el polinomio característico

$$0 = \begin{vmatrix} \cos^2\left(\frac{v_a\kappa_o t}{\sqrt{2}}\right) - \lambda & \frac{\sin(\sqrt{2}v_a\kappa_o t)}{\sqrt{2}} & \sin^2\left(\frac{v_a\kappa_o t}{\sqrt{2}}\right) \\ -\frac{\sin(\sqrt{2}v_a\kappa_o t)}{\sqrt{2}} & \cos(\sqrt{2}v_a\kappa_o t) - \lambda & \frac{\sin(\sqrt{2}v_a\kappa_o t)}{\sqrt{2}} \\ \sin^2\left(\frac{v_a\kappa_o t}{\sqrt{2}}\right) & -\frac{\sin(\sqrt{2}v_a\kappa_o t)}{\sqrt{2}} & \cos^2\left(\frac{v_a\kappa_o t}{\sqrt{2}}\right) - \lambda \end{vmatrix}, \quad (\text{D.0.4})$$

$$= -\lambda^3 + \lambda^2(2\cos(\sqrt{2}v_a\kappa_o t) + 1) - \lambda(2\cos(\sqrt{2}v_a\kappa_o t) + 1) + 1 \quad (\text{D.0.5})$$

$$= (\lambda - 1)(-\lambda^2 + 2\lambda\cos(\sqrt{2}v_a\kappa_o t) - 1), \quad (\text{D.0.6})$$

Nuevamente se obtiene que una raíz de este polinomio es el eigenvalor $\lambda = 1$ cuyo eigenvector corresponde al eigenje. Para obtener los eigenvalores restantes usamos la formula general para polinomios de grado 2, obtenemos que

$$\lambda = \cos(\sqrt{2}v_a\kappa_o t) \mp i \sin(\sqrt{2}v_a\kappa_o t) = e^{\pm i\sqrt{2}v_a\kappa_o t}, \quad (\text{D.0.7})$$

y con ello se obtiene una expresión para las eigenfases o ángulos de rotación en cada instante de tiempo:

$$\psi(t) = \sqrt{2}v_a\kappa_o t. \quad (\text{D.0.8})$$

Por otro lado usando el eigenvalor $\lambda = 1$ podemos calcular los eigenjees resolviendo el siguiente sistema de ecuaciones

$$-\sin^2\left(\frac{v_a\kappa_o t}{\sqrt{2}}\right)x + \frac{\sin(\sqrt{2}v_a\kappa_o t)}{\sqrt{2}}y + \sin^2\left(\frac{v_a\kappa_o t}{\sqrt{2}}\right)z = 0, \quad (\text{D.0.9})$$

$$-\frac{\sin(\sqrt{2}v_a\kappa_o t)}{\sqrt{2}}x - 2\sin^2\left(\frac{v_a\kappa_o t}{\sqrt{2}}\right)y + \frac{\sin(\sqrt{2}v_a\kappa_o t)}{\sqrt{2}}z = 0, \quad (\text{D.0.10})$$

$$\sin^2\left(\frac{v_a\kappa_o t}{\sqrt{2}}\right)x - \frac{\sin(\sqrt{2}v_a\kappa_o t)}{\sqrt{2}}y - \sin^2\left(\frac{v_a\kappa_o t}{\sqrt{2}}\right)z = 0, \quad (\text{D.0.11})$$

se obtiene que

$$x = z_0, \quad (\text{D.0.12})$$

$$y = 0, \quad (\text{D.0.13})$$

$$z = z_0, \quad (\text{D.0.14})$$

y este último vector se puede escoger como unitario, lo que nos deja como eigenje

$$w(t) = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, \frac{1}{\sqrt{2}}\right), \quad (\text{D.0.15})$$

notemos que el signo del mismo puede variar, esto es importante para interpretar algunos resultados.

APÉNDICE D. EIGENFASES Y EIGENEJES DE LAS MATRICES \mathcal{R}_N
CON CURVATURA Y TORSIÓN CONSTANTES

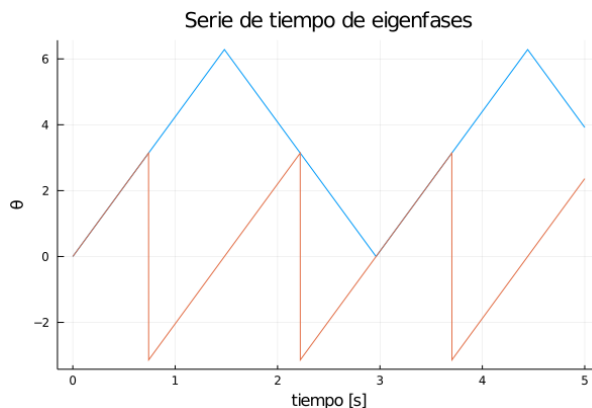


Figura D.1: La gráfica azul son las eigenfases determinadas por el algoritmo descrito en la sección 3.3 y la gráfica naranja son las eigenfases determinadas por la ecuación (D.0.8). Para esta simulación se usaron los parametros de curvatura y torsión como $\kappa_o = 3.0 \text{ m}^{-1}$ y la rapidez de nado como $v_a = 1.0 \text{ ms}^{-1}$.

Con las eigenfases determinadas por (D.0.8) podemos deducir que la función es del tipo sierra. Como se ve en la figura D.1 hay cierta diferencia importante entre el experimento computacional (linea azul) y el obtenido analíticamente (linea naranja) como el contradominio de las eigenfases, en el caso computacional es el intervalo $[0, 2\pi]$ esto tiene sentido pues en el algoritmo discutido en la sección 3.3 se utiliza la función $2\arccos(x)$ cuyo contradominio es justamente $[0, 2\pi]$. Por otro lado las eigenfases descritas en (D.0.8) se obtuvieron con la función $\arctan2(x)$ cuyo contradominio es $(-\pi, \pi]$, es decir es el valor principal del argumento de un complejo.

Sucede de manera similar con los eigenejes determinados por (D.0.15), a pesar que es una constante en el tiempo, las simulaciones muestran que este eje oscila como una onda cuadrada con periodicidad 2π como se ve en la figura D.2 (a), debido a que los eigenejes se determinan con las funciones $\sin(x)$ y $\cos(x)$. A pesar de que cambia el eje (linea azul), también cambia el sentido en el que se rota como se muestra en la figura D.3 lo que hace que el tratamiento teórico y numérico sean equivalentes. Por otro lado se puede obtener el promedio del coseno del ángulo entre un eigeneje de referencia como el inicial y otro en cualquier otro instante en el tiempo (ver figura D.2 (b)) vemos que cuándo es determinista y constante esencialmente solo hay un eje, esto se ve reflejado en la misma gráfica donde solo puede haber dos resultados, que sean paralelos o antiparalelos. Estos resultados nos dan una intuición para obtener más información del caso en el que la curvatura y la torsión son estocásticas.

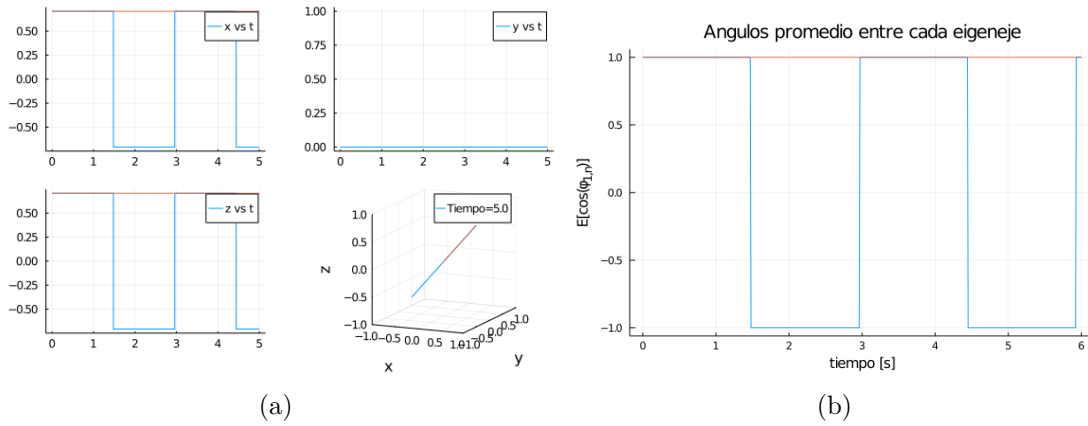


Figura D.2: La gráfica azul son los eigenejes determinadas por el algoritmo descrito en la sección 3.3 y la gráfica naranja son los eigenejes determinadas por la ecuación (D.0.15). En la imagen (a) es la serie de tiempo de los eigenejes y en la imagen (b) es el ángulo ente el eje del paso 1 al paso n en función del tiempo o pasos. Para esta simulación se usaron los parametros de curvatura y torsión como $\kappa_o = 3.0 \text{ m}^{-1}$ y la rapidez de nado como $v_a = 1.0 \text{ ms}^{-1}$.

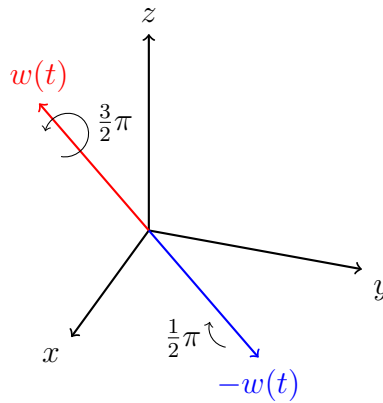


Figura D.3: El eigeneje $w(t)$ de la ecuación (D.0.15) está representado como una flecha roja sin embargo también se puede escoger como su inverso aditivo y sigue siendo eigeneje de la matriz $\mathcal{R}(t)$. Pero para que sea la misma rotación debe cambiar de sentido y ángulo en el que se rota como se ve ejemplifica en la figura, se cambia de $\frac{3}{2}\pi$ a $\frac{1}{2}\pi$ respetando la regla de la mano derecha.

Bibliografía

- [1] Eric Lauga and Raymond E Goldstein. microswimmers. *Phys. Today*, 65(9): 30, 2012.
- [2] Jim A Mossman, Jack T Pearson, Harry D Moore, and Allan A Pacey. Variation in mean human sperm length is linked with semen characteristics. *Human Reproduction*, 28(1):22–32, 2013.
- [3] Clemens Bechinger, Roberto Di Leonardo, Hartmut Löwen, Charles Reichhardt, Giorgio Volpe, and Giovanni Volpe. Active particles in complex and crowded environments. *Reviews of Modern Physics*, 88(4):045006, 2016.
- [4] Hugh C Crenshaw. Orientation by helical motion—i. kinematics of the helical motion of organisms with up to six degrees of freedom. *Bulletin of Mathematical Biology*, 55(1):197–212, 1993.
- [5] Francisco J. Sevilla. Diffusion of active chiral particles. *Phys. Rev. E*, 94:062120, Dec 2016. doi: 10.1103/PhysRevE.94.062120. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.94.062120>.
- [6] Andrew I. Campbell, Raphael Wittkowski, Borge ten Hagen, Hartmut Löwen, and Stephen J. Ebbens. Helical paths, gravitaxis, and separation phenomena for mass-anisotropic self-propelling colloids: Experiment versus theory. *The Journal of Chemical Physics*, 147(8):084905, 2017. doi: 10.1063/1.4998605. URL <https://doi.org/10.1063/1.4998605>.
- [7] H. S. Jennings. On the significance of the spiral swimming of organisms. *The American Naturalist*, 35(413):369–378, 1901. doi: 10.1086/277922. URL <https://doi.org/10.1086/277922>.

- [8] E. M. Purcell. Life at low reynolds number. *American Journal of Physics*, 45(1): 3–11, 1977. doi: 10.1119/1.10903. URL <https://doi.org/10.1119/1.10903>.
- [9] Ting-Wei Su, Liang Xue, and Aydogan Ozcan. High-throughput lensfree 3d tracking of human sperms reveals rare statistics of helical trajectories. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 109(40):16018–16022, 2012.
- [10] Andrew I Campbell, Raphael Wittkowski, Borge Ten Hagen, Hartmut Löwen, and Stephen J Ebbens. Helical paths, gravitaxis, and separation phenomena for mass-anisotropic self-propelling colloids: Experiment versus theory. *The Journal of chemical physics*, 147(8):084905, 2017.
- [11] Benjamin M. Friedrich and Frank Jülicher. Steering chiral swimmers along noisy helical paths. *Phys. Rev. Lett.*, 103:068102, Aug 2009. doi: 10.1103/PhysRevLett.103.068102. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.103.068102>.
- [12] Luis Rincón. Procesos estocásticos. *Departamento de Matemáticas, Facultad de Ciencias de la UNAM*, 2007.
- [13] Hernán Larralde and François Leyvraz. Three-dimensional diffusion with helical persistence. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 48(26): 265001, 2015.
- [14] Madan Lal Mehta. *Random matrices*. Elsevier, 2004.
- [15] Eugene P Wigner. Characteristic vectors of bordered matrices with infinite dimensions i. In *The Collected Works of Eugene Paul Wigner*, pages 524–540. Springer, 1993.
- [16] Craig A Tracy and Harold Widom. On orthogonal and symplectic matrix ensembles. *Communications in Mathematical Physics*, 177(3):727–754, 1996.
- [17] Vasiliki Plerou, Parameswaran Gopikrishnan, Bernd Rosenow, LA Nunes Amaral, and H Eugene Stanley. A random matrix theory approach to financial cross-correlations. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 287(3-4):374–382, 2000.
- [18] Hannes Risken. Fokker-planck equation for one variable; methods of solution. In *The Fokker-Planck Equation*, pages 96–132. Springer, 1996.
- [19] Raúl Toral and Pere Colet. *Stochastic numerical methods: an introduction for students and scientists*. John Wiley & Sons, 2014.
- [20] Wolfgang Kühnel. *Differential geometry*, volume 77. American Mathematical Soc., 2015.
- [21] Carlotta Giannelli. *Rotational moving frames on polynomial space curves: theory and applications*. Ph.D. Thesis. Università degli Studi di Firenze, 2010.

-
- [22] J. J. Stoker. *Differential Geometry*. John Wiley & Sons., 1989.
- [23] Vera Lopez Arbiza et al. Referencia movil a lo largo de una curva. 2017.
- [24] Charles E Porter. Statistical theories of spectra: fluctuations. Technical report, 1965.
- [25] Peter J Forrester. *Log-gases and random matrices (LMS-34)*. Princeton University Press, 2010.
- [26] Alan Edelman and Yuyang Wang. Random matrix theory and its innovative applications. In *Advances in Applied Mathematics, Modeling, and Computational Science*, pages 91–116. Springer, 2013.
- [27] João Pedro Morais, Svetlin Georgiev, and Wolfgang Spröβig. *Real quaternionic calculus handbook*. Springer, 2014.
- [28] Johan Ernest Mebius. Derivation of the euler-rodrigues formula for three-dimensional rotations from the general formula for four-dimensional rotations. *arXiv preprint math/0701759*, 2007.
- [29] WH Furry. Isotropic rotational brownian motion. *Physical Review*, 107(1):7, 1957.
- [30] Jian S Dai. Euler–rodrigues formula variations, quaternion conjugation and intrinsic connections. *Mechanism and Machine Theory*, 92:144–152, 2015.
- [31] Giorgio Volpe and Giovanni Volpe. Simulation of a brownian particle in an optical trap. *American Journal of Physics*, 81(3):224–230, 2013.
- [32] João R Cardoso and F Silva Leite. Exponentials of skew-symmetric matrices and logarithms of orthogonal matrices. *Journal of computational and applied mathematics*, 233(11):2867–2875, 2010.
- [33] Vyacheslav Leonidovich Girko. Distribution of eigenvalues and eigenvectors of orthogonal random matrices. *Ukrainian Mathematical Journal*, 37(5):457–463, 1985.
- [34] Ioannis P Stavroulakis and Stepan A Tersian. *Partial differential equations: An introduction with Mathematica and MAPLE*. World Scientific Publishing Company, 2004.
- [35] Manuel Delgado. Classroom note: The lagrange–charpit method. *SIAM review*, 39(2):298–304, 1997.