



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

FACULTAD DE CIENCIAS

**MOVIMIENTO ACTIVO CONFINADO SUJETO A
FLUCTUACIONES TÉRMICAS**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

F Í S I C O

P R E S E N T A:

HUGO URIEL GRANADOS TORRES

DIRECTOR DE TESIS:

DR. FRANCISCO JAVIER SEVILLA PÉREZ



Ciudad Universitaria, CD. MX., 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.

Hoja de Datos del Jurado

1. Datos del alumno

Granados
Torres
Hugo Uriel
5547918587
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Física
313028667

2. Datos del tutor

Dr.
Francisco Javier
Sevilla
Pérez

3. Datos del sinodal 1

Dr.
Luis Fernando
Magaña
Solís

4. Datos del sinodal 2

Dra.
Patricia
Goldstein
Menache

5. Datos del sinodal 3

Dr.
Pedro Eduardo
Miramontes
Vidal

6. Datos del sinodal 4

Dr.
Alejandro
Vásquez
Arzola

7. Datos del trabajo escrito

Movimiento activo confinado sujeto a fluctuaciones térmicas

93 p

2021

A mis padres, mi hermana y mis abuelos, quienes durante
toda mi vida han creído en mí y
me han apoyado en todos
los aspectos.

Agradecimientos

Al Dr. Francisco Javier Sevilla Pérez por su asesoría y orientación a lo largo de todo este proyecto.

A todos los profesores que tuve a lo largo de la carrera, que me brindaron conocimientos y experiencia fundamentales para mi vida en el ámbito científico, así como también para todos los compañeros y amigos que formé durante todo ese tiempo y que con su apoyo, desde en lo académico hasta en lo personal, pude concretar todos mis proyectos universitarios.

Al Dr. Fernando Magaña, al Dr. Alejandro Arzola, a la Dra. Patricia Goldstein y al Dr. Pedro Miramontes por sus observaciones y sugerencias para el mejoramiento de este trabajo y por formar parte de mi jurado de tesis.

A mi familia que fue testigo del enorme esfuerzo empeñado para lograr mis objetivos y que de alguna manera siempre recibí apoyo incondicional por parte de ellos.

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.

Resumen

En los últimos años un tema de gran interés en Física Estadística ha sido el de materia activa, el cual comprende sistemas de escala macroscópica y microscópica capaces de extraer energía de su entorno para convertirla en energía cinética de autopropulsión; debido a esta característica, dichos sistemas se encuentran fuera de equilibrio termodinámico, por lo que se han ido creando diversos modelos de partículas a fin de conocer más sobre su comportamiento y propiedades interesantes. Uno de éstos es el modelo de partículas activas “run-and-tumble”, que predice la dinámica de microorganismos bacterianos autopropulsados con patrones característicos de nado en un medio acuoso; establece que cada partícula se mueve en una dirección determinada a lo largo de una longitud de persistencia (run), antes de que realice un cambio repentino de dirección (tumble). A raíz de que los cambios de dirección se dan aleatoriamente, el modelo describe formalmente la trayectoria como una caminata aleatoria, pudiendo conocer de esta última su distribución de probabilidad. El caso elemental en nuestro proyecto se desarrolla en una dimensión y consiste en el confinamiento de un ensamble de este tipo de partículas a causa de un potencial armónico, considerando los efectos de las fluctuaciones térmicas debidas al medio.

La meta principal es poder conocer la difusión de partículas del sistema de interés, a partir de la deducción analítica de su distribución de probabilidad. Para una mejor discusión e interpretación de los resultados obtenidos de este análisis, se procede a analizar cuatro casos más *simples*; estos corresponden al confinamiento por paredes rígidas y al confinamiento por un potencial armónico, ambos empleados para un ensamble de partículas Brownianas y para un ensamble de partículas “run-and-tumble”; en los dos casos de confinamiento para las partículas activas primero se despreja el efecto de las fluctuaciones térmicas, obteniéndose los resultados presentes en la literatura. En segunda instancia se presenta un análisis exhaustivo de la distribución a diferentes parámetros y en ciertos regímenes interesantes ya considerando el efecto de las fluctuaciones térmicas, estableciendo una analogía entre la difusión térmica, la contribución del potencial externo y la actividad de las partículas, donde se pudo obtener que, al considerar este factor de las fluctuaciones, la fuerza debida al potencial pierde contribución y el desplazamiento de las partículas se rige mayormente por este aumento de energía en el sistema a pesar de seguir habiendo actividad. Estos resultados motivan una segunda meta que consiste en un mapeo del ensamble del caso principal con el fin de obtener una temperatura efectiva como medida de no equilibrio; este desarrollo surge de suponer que el

sistema se trata de un ensamble de partículas pasivas confinadas por el potencial y sumergidas en un baño térmico no homogéneo originado por la actividad y el efecto de las fluctuaciones; los perfiles de temperatura obtenidos brindan una descripción consistente con el comportamiento de las partículas en todo el espacio unidimensional y en ciertos casos límites se recupera lo ya encontrado en la literatura. Estos resultados obtenidos de ambos objetivos pueden brindar gran herramienta en el análisis de este tipo de sistemas ya que, a pesar de no haberse obtenido resultados experimentales de partículas “run-and-tumble” confinadas por una trampa armónica considerándose los efectos de las fluctuaciones térmicas, se han hecho experimentos con bacterias *E.coli* (cuya trayectoria puede ser descrita por el modelo “run-and-tumble”) confinadas por paredes rígidas o potenciales de atrapamiento donde podría considerarse la difusión térmica y contrastar lo obtenido con lo presentado en este trabajo.

Índice general

Introducción	1
1. Antecedentes	3
1.1. Movimiento Browniano	4
1.1.1. Ecuación de difusión	7
1.1.2. Solución de la ecuación de difusión para una partícula Browniana libre	11
1.2. Movimiento Activo	14
1.2.1. Movimiento Browniano Activo	15
1.2.2. Movimiento “run-and-tumble”	17
2. Movimiento Browniano y “run-and-tumble” confinados	23
2.1. Movimiento Browniano confinado	24
2.1.1. Confinamiento por paredes rígidas	25
2.1.2. Confinamiento por un potencial armónico.	29
2.2. Movimiento “run-and-tumble” confinado	33
2.2.1. Confinamiento por paredes rígidas	34
2.2.2. Confinamiento por un potencial armónico	43
3. Movimiento activo confinado sujeto a fluctuaciones térmicas	53
3.1. Confinamiento por un potencial armónico	54
3.2. Temperatura efectiva	68
4. Epílogo	77
4.1. Resultados y discusiones	77
4.2. Conclusiones	79
A. Apéndice	81
A.1. Deducción de $\hat{P}(k, t)$ para movimiento Browniano confinado por un potencial armónico	81
A.1.1. Transformada de Fourier inversa de la solución $\hat{P}(k, t)$	83

A.2. Límite estacionario de $\tilde{P}(x, s)$ para movimiento “run-and-tumble” confinado por paredes rígidas	84
A.3. Límite efectivo de $P(x)$ para movimiento “run-and-tumble” confinado por un potencial armónico	85
A.4. Solución del perfil de temperatura efectivo $T(x)$	88

Bibliografía	91
---------------------	-----------

Introducción

El presente proyecto de investigación aborda un tema de gran interés en el campo de estudio de la materia activa, el cual consiste en un conjunto de partículas activas “run-and-tumble” confinadas por un potencial armónico, considerándose el efecto de las fluctuaciones térmicas debidas al medio en el que se encuentran sumergidas. Su relevancia radica en el hecho de ser el primer trabajo que considera este tipo de partículas confinadas por una trampa armónica y tomando en cuenta la difusión térmica, a pesar de que ya se han estudiado distintos casos de confinamiento de este tipo de partículas sin considerar los efectos de las fluctuaciones térmicas o considerándose pero para otros tipos de confinamiento que no tienen que ver con un potencial armónico, por lo que el sistema a analizar es una pieza clave que complementa todo el desarrollo de investigación de este tipo de materia sujeta a diversas condiciones. Cabe resaltar que es muy importante tomar en cuenta el efecto de las fluctuaciones ya que nuestro sistema a analizar se encuentra a una escala microscópica en la cual adquieren relevancia y, como bien sabemos, la ciencia tiene como objetivo poder describir sistemas lo más parecidos a los de la naturaleza donde se tienen diversos factores que contribuyen en diferente medida, por lo que el problema no es trivial al momento de resolverse como veremos más adelante.

En el capítulo 1 partimos de los primeros vestigios del estudio de la materia activa recordando varias investigaciones que dieron origen al estudio del movimiento Browniano, abordando posteriormente de manera analítica al movimiento Browniano sin ninguna restricción (movimiento Browniano libre) y mencionando características relevantes referentes al movimiento activo “run-and-tumble”, deduciendo así resultados importantes como la ecuación de difusión. En el capítulo 2, proseguimos a analizar el movimiento Browniano confinado por dos tipos de constricciones, las cuales son por paredes rígidas y por un potencial armónico, a partir de la ecuación de difusión; estos dos casos de confinamiento también se consideran para un ensamble de partículas “run-and-tumble”, brindando buen desarrollo y herramienta para el sistema de interés que se aborda más adelante.

En el capítulo 3 se estudia el caso de interés, que corresponde al ensamble de partículas “run-and-tumble” confinadas por un potencial armónico, pero ahora ya considerando el efecto de las fluctuaciones térmicas originadas por el medio. Como resultado interesante de este análisis, que también se presenta en este capítulo, tenemos a la temperatura efectiva, la cual surge a partir de un mapeo de este tipo de partículas a un ensamble de partículas Brownianas, suponiéndolas inmersas en

un baño térmico inhomogéneo originado por la actividad. Este concepto se aborda a modo de tener una medida de no equilibrio del sistema. Finalmente en el capítulo 4, hacemos un exhaustivo análisis y discusión sobre los resultados obtenidos y presentamos las conclusiones respectivas haciendo énfasis en la relevancia y trascendencia que puede llegar a generar este proyecto de investigación.

Capítulo 1

Antecedentes

El siglo XIX fue un periodo en el que comenzaron su desarrollo diversas ramas importantes en el campo de la Física y una de éstas fue la Mecánica Estadística. Dicha área inició sus bases con Maxwell, Boltzmann y Gibbs a partir de la Termodinámica, describiendo sistemas macroscópicos con base en la predicción del comportamiento de la materia y su interacción con la energía. A pesar de que se siguió con una extensión para incluir sistemas cerca del equilibrio termodinámico, creció también el interés por estudiar sistemas fuera de éste, principalmente a nivel microscópico. Esto surge debido a que, como bien sabemos, el equilibrio termodinámico es un estado al que llega un sistema una vez que sus propiedades dejan de variar con el tiempo si dejamos de perturbarlo de manera externa y, estrictamente hablando, los sistemas en la naturaleza se encuentran fuera de equilibrio, donde a una escala microscópica se vuelve más evidente la interacción del sistema con sus alrededores; un parámetro considerable debido a esto es la energía de las fluctuaciones, refiriéndonos a fluctuaciones como las desviaciones del comportamiento promedio de un sistema físico ocasionadas regularmente por los alrededores [13]. En los últimos años se han obtenido resultados teóricos que hacen predicciones sobre procesos energéticos en este tipo de sistemas y se han aplicado con éxito en técnicas de nanomanipulación y nanotecnología.

Un concepto importante en termodinámica son las variables de estado, las cuales especifican de manera única el estado termodinámico de un sistema, teniendo como ejemplos de éstas la temperatura, la presión, la masa y el volumen, donde para especificar la magnitud de dichas variables comúnmente se pone al sistema en contacto térmico con un baño, que puede ser un conjunto de fuentes de energía, de volumen, de masa, etc. Un sistema se encuentra fuera de equilibrio termodinámico cuando las propiedades del sistema cambian con el tiempo o cuando el calor, trabajo o masa intercambiados entre éste y los alrededores, son distintos de cero [7]. Se han distinguido dos principales estados fuera de equilibrio: el primero es denominado “transitorio”, en el que inicialmente el sistema se encuentra en un estado de equilibrio, luego se lleva fuera de éste a partir de una perturbación externa y regresa de manera rápida a un nuevo estado de equilibrio una vez que

dicha perturbación deja de cambiar. En segunda instancia tenemos al “estacionario”, en el cual el sistema es llevado mediante fuerzas externas a un estado de no equilibrio, donde sus propiedades que definen su comportamiento permanecen invariantes respecto del tiempo, pero distintas de cero. Esto quiere decir que el sistema puede intercambiar calor, masa o trabajo con sus alrededores, pero los valores de estas variables permanecen constantes en el tiempo, teniendo un estado estacionario fuera de equilibrio termodinámico; este tipo de estado es un proceso irreversible que no puede ser descrito por la distribución de Boltzmann-Gibbs [4].

Uno de los procesos estudiados dentro de los sistemas fuera de equilibrio, comprende de un conjunto de partículas sumergidas en un medio acuoso que se desplazan por las constantes colisiones con las moléculas del fluido al que se encuentran sujetas; a este fenómeno se le conoce como movimiento Browniano. Su nombre fue atribuido por el científico Robert Brown que fue quien inició su análisis al sumergir granos de polen en un medio viscoso, encontrando que la trayectoria descrita por las partículas se volvía más irregular cuanto más aumentaba la temperatura del medio [6].

Otro conjunto de sistemas que se encuentra estrechamente relacionado con el movimiento Browniano, es el que engloba la materia activa; ésta comprende un gran número de agentes caracterizados por ser capaces de extraer energía de su entorno y convertirla en energía cinética de autopropulsión [31]. La razón por la que estos sistemas se encuentran intrínsecamente fuera de equilibrio termodinámico es por su continuo consumo de energía para su movilidad. La materia activa abarca todas las escalas, desde macroscópica hasta microscópica, y se ha ido clasificando en varios conjuntos de partículas a partir de la creación de diferentes “modelos” que puedan describir su dinámica; dos ejemplos de estos modelos son el movimiento Browniano activo y el movimiento activo “run-and-tumble”. Por un lado el movimiento Browniano activo se da por la propiedad interna de autopropulsión de las partículas que poseen una velocidad de nado, al contrario de las partículas pasivas¹ del movimiento Browniano.

Por otro lado, el modelo de partículas activas de mayor interés en esta investigación, es el “run-and-tumble”, el cual se comenzó a estudiar a partir de la ecuación de Langevin y la ecuación de difusión (al igual que el movimiento Browniano), obteniendo de este último resultado una solución de una distribución de probabilidad que describe, como su nombre lo indica, la difusión de partículas bajo ciertas condiciones impuestas.

1.1. Movimiento Browniano

Como se mencionó anteriormente, Robert Brown en 1827 comenzó el análisis del movimiento de una partícula en un medio líquido, en el que notó que la trayectoria descrita por ésta se volvía más irregular cuanto más aumentaba la temperatura del medio, variable que se encuentra relacionada con la energía cinética de las moléculas; a este fenómeno lo designó como “movimiento Browniano

¹Partículas que no se desplazan por una velocidad de nado propia como las partículas activas

clásico”² [6]. En primera instancia Brown se encontraba investigando el proceso de fertilización de la “Clarkia pulchella”, una especie de planta con flores recién descubierta en ese entonces, cuando notó con su microscopio un “movimiento oscilatorio rápido” de partículas microscópicas provenientes de los granos de polen suspendidas en el agua. Otros investigadores habían notado este fenómeno antes, pero Brown fue el primero en estudiarlo a profundidad. Inicialmente creyó que tal movimiento era una actividad vital peculiar de las células sexuales masculinas de las plantas, pero luego descubrió que el polen de las plantas muertas de más de un siglo mostraba el mismo comportamiento. Brown llamó a esto un “hecho muy inesperado de la aparente vitalidad retenida por estas moléculas tanto tiempo después de la muerte de la planta” [22]. Un estudio adicional reveló más tarde que se podía observar el mismo movimiento no sólo con partículas de otras sustancias orgánicas, sino también con astillas de vidrio o granito y partículas de humo.

Más tarde, quien realizó una teoría cuantitativa acerca de este fenómeno fue Albert Einstein en 1905, el cual consideró de entrada dos hipótesis relevantes y fuertemente discutidas en su tiempo; estas corresponden a la hipótesis atomística, que plantea que este movimiento irregular se debe a las incesantes colisiones de las moléculas del medio sobre la partícula de interés, como se puede observar en la Figura 1.1; y la hipótesis probabilística, necesaria para la descripción de este movimiento. Dichas colisiones son tratadas efectivamente como fuerzas estocásticas (consideradas también por P. Langevin en su ecuación sobre movimiento Browniano³), las cuales deben mantener el equilibrio energético entre partículas y el medio; tal equilibrio está dado por el teorema de fluctuación-disipación, que establece que una partícula Browniana se desplaza debido a una fuerza de arrastre que disipa su energía cinética y la convierte en calor (disipación); este calor se convierte en energía térmica en el medio circundante, provocando mayores colisiones entre las moléculas de éste y la partícula Browniana, resultando una transferencia de energía (fluctuación) [19].

Einstein descubrió que, según la teoría atómica, tendría que haber un movimiento observable de partículas microscópicas en suspensión y, razonando sobre la base de la mecánica estadística, mostró que para una partícula tan microscópica la diferencia aleatoria entre la presión del bombardeo molecular en dos lados opuestos haría que se tambaleara constantemente hacia adelante y hacia atrás. De esto dedujo que una partícula más pequeña, un fluido menos viscoso y una temperatura más alta, aumentarían la cantidad de movimiento que uno podría esperar observar. Se dió cuenta de

²Término dado por tratarse de partículas pasivas, en contraste con el movimiento Browniano activo descubierto posteriormente.

³La ecuación de Langevin describe el movimiento Browniano de una partícula en un fluido; establece que la partícula sufre por un lado un frenado debido a la fuerza de fricción neta ejercida por el medio (Ley de Stokes) y por otro un empuje debido a fluctuaciones locales debidas a la tasa de colisiones:

$$m \frac{d^2}{dt^2} \vec{r} = -\lambda \frac{d}{dt} \vec{r} + \eta(t), \quad (1.1)$$

siendo λ el coeficiente de fricción por la fuerza neta del medio y $\eta(t)$ la fuerza estocástica debida a las colisiones[21].

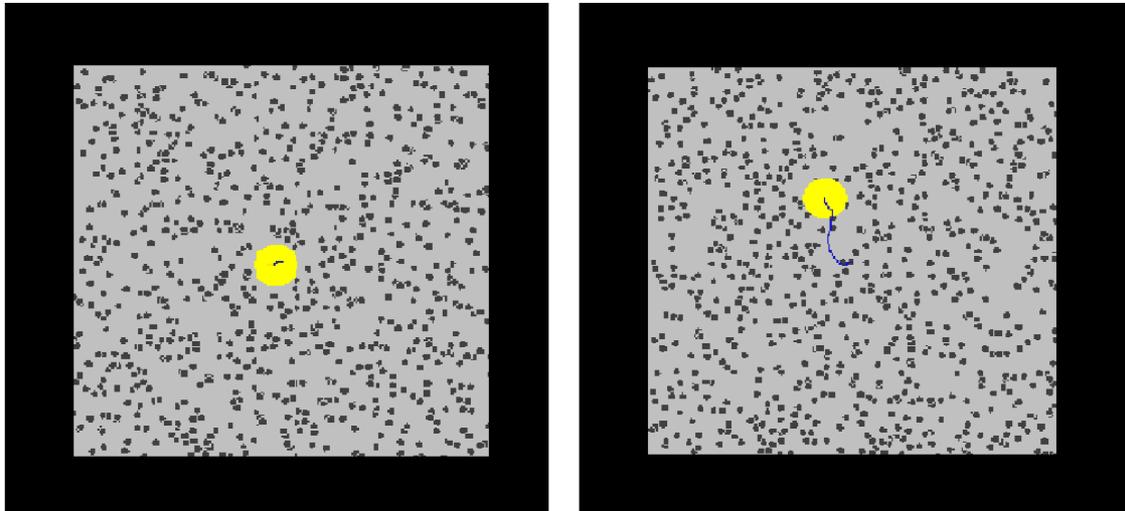


Figura 1.1: Movimiento Browniano que realiza una partícula de polvo que colisiona con un gran conjunto de partículas de menor tamaño (moléculas de gas) las cuales se mueven con diferentes velocidades en direcciones aleatorias. *Fuente* : <https://weelookang.blogspot.com/2010/06/ejs-open-source-brownian-motion-gas.html>

que, después de un periodo de tiempo, la partícula tendería a desviarse desde su punto de partida, de modo que era posible calcular la probabilidad de que se moviera una cierta distancia, en cualquier dirección dada y durante un intervalo de tiempo determinado. La expresión que obtuvo para la densidad de probabilidad describía una curva gaussiana, la cual surge cuando la variable aleatoria es la suma de muchas variables aleatorias independientes y estadísticamente idénticas, demostrando que en este caso los múltiples empujones microscópicos de las moléculas se suman, generando un movimiento total colectivo [16]. A la colectividad que permite describir los estados de un sistema macroscópico compuesto por un gran número de partículas, se le denomina “ensamble” [32].

En la segunda mitad del siglo XX el científico Daniel Deutsch, un químico egresado de la Universidad de Pasadena en California, aseguró que el microscopio de bronce de Brown no era lo suficientemente sensible para detectar el movimiento aleatorio de pequeñas partículas en un fluido. Deutsch articuló sus argumentos en el “Bulletin of the American Society of Physics” que las muestras de Brown eran demasiado grandes para desplazarse, pero en el caso en el que sí lo hicieran, éstas se encontraban mal aisladas de las vibraciones externas, de modo que su movimiento pudo no haber sido causado por las moléculas del fluido sino por alguna otra fluctuación. En contraste con esta estipulación, el científico Brian Ford aseguró haber visto el movimiento Browniano a través de uno de sus propios microscopios. Él contrarresta la analogía de Deutsch en un artículo publica-

do en “The Microscope”, titulado “Robert Brown, Brownian Movement and Teeth Marks on the Hatbrim”, donde establece que Brown buscó gránulos sumamente diminutos⁴ dentro del polen y que logró amortiguar las vibraciones externas al momento de hacer sus observaciones. Comprobó que el microscopio fue atornillado en una caja de caoba haciéndolo extremadamente estable y que las micropartículas (gránulos) se sumergieron en agua emulsionada en aceite para bloquear vibraciones atmosféricas. “Brown no sólo anticipó las preguntas de Deutsch, sino que construyó experimentos para refutarlos”, dijo Ford [6].

Cabe destacar que a raíz del estudio del movimiento Browniano, se ha podido deducir en los últimos años el tamaño aproximado de las partículas sumergidas a modo de que puedan exhibir este tipo de movimiento dependiendo el tipo de fluido al que estén sujetas; se encontró que para una solución⁵ el tamaño de partícula es alrededor de $0,1 - 10 \text{ nm}$, mientras que para un coloide⁶ su tamaño ronda los $10 - 100 \text{ nm}$; por otro lado, para una suspensión⁷ el tamaño de partícula tiene que ser mayor a los 100 nm [27].

1.1.1. Ecuación de difusión

En la naturaleza existen fenómenos de transporte que tienen lugar en aquellos procesos conocidos como procesos de transferencia, en los que se establece el movimiento de una propiedad (ya sea masa, momento o energía) en una o varias direcciones bajo la acción de una fuerza impulsora. Los fenómenos de transferencia de masa son los más comunes en la naturaleza y dependen de la dinámica del sistema en que se lleva a cabo, para lo cual se tienen dos tipos: transferencia convectiva y difusión molecular.

Al proceso físico en el que una sustancia tiende a extenderse de manera constante desde regiones de alta concentración a regiones de menor concentración, se le llama difusión molecular [34]. Este concepto puede considerarse una manifestación macroscópica del movimiento Browniano que ocurre a nivel microscópico; por tanto, es posible estudiar la difusión de una partícula Browniana y calcular su comportamiento promedio. Existen fundamentalmente dos tipos de difusión molecular: difusión del trazador y difusión química. La primera es una mezcla espontánea de moléculas que tiene lugar en ausencia de un gradiente de concentración, lo cual suele ser idéntica a la autodifusión y puede darse en el equilibrio; por otro lado, la difusión química se da en presencia de un gradiente de concentración (o potencial químico) y da como resultado un transporte neto de masa de un sistema (componente) en otro, lo cual es siempre un proceso de no equilibrio que aumenta la entropía del sistema y que posteriormente lo acerca al equilibrio. Este proceso es descrito por la ecuación de difusión que surge a partir de la deducción de la Primera Ley de Fick⁸.

⁴Partículas de un radio del orden de μm .

⁵Mezcla homogénea de dos o más sustancias donde una está disuelta en otra; un ejemplo de ésta es el agua salada.

⁶Mezcla homogénea cuyas partículas son lo suficientemente pequeñas para permanecer suspendidas.

⁷Mezcla heterogénea compuesta por partículas grandes.

⁸La primera ley de Fick relaciona al flujo difusivo con la concentración bajo la asunción de un estado estacionario, postulando que el flujo va desde una región de alta concentración a las regiones de baja concentración, con una

Algunos ejemplos de los innumerables procesos de difusión son la difusión de contaminantes a través de la atmósfera, la difusión de “huecos” (regiones diminutas en las que el potencial de carga eléctrica es positivo) a través de un semiconductor y la difusión de calcio a través del tejido óseo en organismos vivos [8]. Esto nos lleva a decir que, aunque la causa habitual de difusión es un gradiente de concentración, la difusión también puede ser originada por un gradiente de presión, por un gradiente de temperatura o por la aplicación de una fuerza externa como en el caso de una centrifuga.

Regresando a la investigación de Einstein, él incorpora de manera natural un aspecto dinámico para conocer la difusión de una partícula Browniana. Reconoce tres escalas de tiempo, las cuales son un tiempo macroscópico asociado al tiempo entre colisiones t_{coll} , un tiempo mesoscópico Δt y un tiempo de observación t_{obs} , de modo que $t_{coll} \ll \Delta t \ll t_{obs}$. En Δt , la partícula recibe impactos de las moléculas del fluido, por lo que la diferencia en posición $\Delta r = r(t + \Delta t) - r(t)$ es una cantidad aleatoria tal que su distribución de probabilidad no se conoce. También asume que Δr tiene una distribución $\phi(\Delta r; \Delta t)$ tal que

$$\int \int \int d^3(\Delta r) \phi(\Delta r; \Delta t) = 1, \quad (1.4)$$

de modo que

$$\phi(\Delta r; \Delta t) = \phi(|\Delta r|; \Delta t). \quad (1.5)$$

Considerando el valor absoluto del desplazamiento Δr de la partícula en el intervalo de tiempo Δt , la función de distribución $\phi(\Delta r; \Delta t)$ es par en un dominio $(-\infty, \infty)$ de Δr , lo cual tiene todo el sentido físico ya que si la partícula se encontrara en una dimensión e inicialmente se ubicara en la posición $x = 0$, tendría la misma probabilidad de desplazarse hacia la derecha que a la izquierda. Esto nos lleva al siguiente resultado

$$\int \int \int d^3(\Delta r) \Delta r \phi(\Delta r; \Delta t) = 0, \quad (1.6)$$

el cual nos dice que valor esperado de Δr es cero. Podemos entender que hay dependencia en Δt por las colisiones incesantes de las moléculas con la partícula, pues debido a éstas, la incertidumbre en la posición será mayor cuanto mayor sea el tiempo entre observaciones.

magnitud que es proporcional al gradiente de concentración, cuya expresión está dada por

$$J = -D\nabla\phi, \quad (1.2)$$

siendo J el vector de flujo difusivo, ϕ la concentración y D el coeficiente de difusión. Además existe la Segunda Ley de Fick que predice la forma en que la difusión causa que la concentración cambie con el tiempo dada por

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = D\nabla^2\phi. \quad (1.3)$$

Ahora, se debe suponer que existe el siguiente resultado

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int \int \int d^3(\Delta r) \Delta r^2 \phi(\Delta r; \Delta t); \quad (1.7)$$

para que este límite sea finito, el valor esperado de Δr^2 debe ser proporcional al intervalo de tiempo Δt , lo cual tiene sentido físico ya que al tender a cero Δt , la partícula no puede desplazarse longitudes grandes en ese tiempo. Si consideramos la distribución de probabilidad $P(r, t)$ de encontrar a la partícula en la posición r , al tiempo t y en un elemento de volumen d^3r , la ecuación que satisface esta función se construye a partir de suponer que

$$P(r, t + \Delta t) = \int \int \int d^3(\Delta r) \phi(\Delta r; \Delta t) P(r + \Delta r, t), \quad (1.8)$$

lo cual es sumamente válido ya que la distribución de probabilidad de encontrar a la partícula en una posición r a un tiempo $t + \Delta t$ requiere de todas las posibilidades de que la partícula se encuentre en una posición $r + \Delta r$ en el tiempo t , multiplicada por la probabilidad de que el desplazamiento sea Δr , ($\phi(\Delta r, \Delta t)$). Entonces, si suponemos Δt muy pequeño, se esperaría que $\phi(\Delta r; \Delta t)$ tuviera un ancho muy angosto, por lo que la ecuación (1.5) puede desarrollarse en series de Taylor, teniendo que

$$P + \left[\frac{\partial}{\partial t} P(r, t) \right] \Delta t + \dots = \int \int \int d^3(\Delta r) \phi(\Delta r; \Delta t) \cdot [P(r, t) + \nabla P(r, t) \cdot \Delta r + \frac{1}{2} (\Delta r \cdot \nabla)^2 P(r, t) + \dots]. \quad (1.9)$$

Observamos que el primer término de ambos lados de la ecuación se simplifican por la propiedad descrita en la ecuación (1.1) y al haber planteado con anterioridad que $\phi(\Delta r; \Delta t)$ presenta simetría esférica en todo el espacio en (1.3), el segundo término del lado derecho de la ecuación es cero, obteniendo finalmente la expresión

$$\frac{\partial}{\partial t} P(r, t) = D \nabla^2 P(r, t), \quad (1.10)$$

que corresponde a ser la ecuación de difusión y cabe mencionar que es un caso particular de la ecuación de Fokker-Planck⁹ y tiene la misma forma de la Segunda Ley de Fick. El término D es justamente el límite dado en (1.4), y corresponde a ser el llamado “coeficiente de difusión”, el cual tiene unidades de $\text{masa} \times (\text{velocidad})^2 \times \frac{\text{tiempo}}{\text{masa}} = \frac{(\text{longitud})^2}{\text{tiempo}}$, significando el área por unidad de tiempo que explora la partícula Browniana; este coeficiente podemos notar que no tiene ninguna

⁹Ecuación diferencial parcial que describe la evolución temporal de la densidad de probabilidad de una partícula bajo la influencia de fuerzas de arrastre y fuerzas aleatorias, como en el movimiento Browniano[18].

dependencia lineal ni de pende de ningún otro parámetro (es constante), por lo que se considera de tipo “Fickiano”. Simplificando la ecuación (1.7) a una sola dimensión, ésta es de la forma

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t), \quad (1.11)$$

y si la multiplicamos por x^2 e integramos en todo el espacio, se tiene que

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 P(x, t) dx = D \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t) dx; \quad (1.12)$$

observamos que el término que se deriva en el lado izquierdo de la ecuación es $\langle x^2(t) \rangle$, el cual corresponde al desplazamiento cuadrático promedio, con x dependiente de t , considerando que dependiendo del tiempo de observación es cuánto se va a desplazar la partícula Browniana. Obtenemos finalmente que

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle x^2(t) \rangle = 2D, \quad (1.13)$$

donde

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t) dx = \frac{\partial}{\partial x} \left[x^2 \frac{\partial}{\partial x} P(x, t) \right] \Big|_{-\infty}^{+\infty} - 2 \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial}{\partial x} P(x, t) dx, \quad (1.14)$$

teniendo que el primer término del lado derecho es cero por ser $P(x, t)$ simétrica y que el segundo a su vez es igual a

$$-2 \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial}{\partial x} P(x, t) dx = -2 \frac{\partial}{\partial x} [P(x, t)x] \Big|_{-\infty}^{+\infty} + 2 \int_{-\infty}^{+\infty} P(x, t) dx = 2, \quad (1.15)$$

ya que el primer término del lado derecho es cero por simetría mientras que el segundo es igual a 2 porque la probabilidad de que la partícula se encuentre en todo el espacio unidimensional es 1. De este modo, se obtiene la ecuación

$$\langle x^2(t) \rangle = 2Dt, \quad (1.16)$$

donde a la dependencia lineal con el tiempo del desplazamiento cuadrático promedio se le conoce como “difusión normal”. Este tipo de difusión se presenta en una gran variedad de fenómenos de transporte tales como el transporte de electrones y agujeros en dispositivos semiconductores, en átomos intersticiales inyectados en sólidos, en el transporte de agua y nutrientes a través de membranas en organismos vivos, en la propagación de la malaria por mosquitos, en la propagación de calor en sólidos, entre muchos procesos más.

Es importante mencionar que una vez conociendo el valor de la constante de difusión D , podemos determinar la temperatura absoluta del fluido (T) a partir de la relación de Einstein-Smoluchowski dada por

$$T = \frac{D}{\mu k_B}, \quad (1.17)$$

donde μ es la movilidad de la partícula y k_B la constante de Boltzmann.

1.1.2. Solución de la ecuación de difusión para una partícula Browniana libre

A raíz del movimiento colectivo que realizan las partículas Brownianas, el resolver la ecuación de difusión para un conjunto de este tipo de partículas es análogo a resolverla para una sola. Así que, con el fin de resolver la ecuación (1.8) para un ensamble de partículas Brownianas libres en una dimensión, partimos de considerar la transformada de Fourier, la cual está definida por

$$\hat{f}(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} f(x) dx, \quad (1.18)$$

donde $\hat{f}(k)$ es la transformada de Fourier de $f(x)$. Esto en principio lo podemos hacer si suponemos la siguiente condición de frontera

$$P(x = \pm\infty, t) = 0. \quad (1.19)$$

Al determinar la transformada de (1.8), notamos que para el miembro derecho de la ecuación ocurre que

$$\begin{aligned} D \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t) dx &= D e^{-ikx} \frac{\partial}{\partial x} P(x, t) \Big|_{-\infty}^{+\infty} + ikD \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} \frac{\partial}{\partial x} P(x, t) dx = \\ & ikD e^{-ikx} P(x, t) \Big|_{-\infty}^{+\infty} - k^2 D \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ikx} P(x, t) = -k^2 D \hat{P}(k, t), \end{aligned} \quad (1.20)$$

observando que las evaluaciones en (1.17) son cero debido a que la distribución de probabilidad decae lo suficientemente rápido como para argumentar que en infinito se anula. Por tanto, la ecuación de difusión toma la forma

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{P}(k, t) = -Dk^2 \hat{P}(k, t), \quad (1.21)$$

cuya solución es

$$\hat{P}(k, t) = \hat{P}(k, 0) e^{-Dk^2 t} \quad (1.22)$$

denotando a $\hat{P}(k, 0)$ comola condición inicial. $P(x, t)$ se encuentra tomando la transformada de Fourier inversa de (1.19), la cual está definida como

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} \hat{f}(k) dk, \quad (1.23)$$

por lo que aplicando ésta a $\hat{P}(k, t)$, tenemos que

$$P(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} P(x - x', t) P(x', 0) dx'. \quad (1.24)$$

A la expresión en (1.21) se le conoce como la convolución de $P(x, t)$, donde $P(x - x', t)$ es llamado “propagador”, que viene siendo la transformada inversa de Fourier de e^{-Dk^2t} dado por

$$P(x - x', t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp \left[-\frac{(x - x')^2}{4Dt} \right], \quad (1.25)$$

el cual nos da la probabilidad de que la partícula se encuentre en la posición x al tiempo t dado que inicialmente se encontraba en x' . Sustituyendo esta expresión en la convolución tenemos que

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{(x-x')^2}{4Dt}} P(x', 0) dx'. \quad (1.26)$$

El término $P(x', 0)$ es la condición inicial, la cual si consideramos el caso en el que el ensamble de partículas se encuentra en el origen inicialmente, es de la forma

$$P(x', 0) = \delta(x'), \quad (1.27)$$

donde a partir de (1.16) y (1.24), podemos decir que se satisfacen la siguiente condición de normalización

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(x, t) dx = 1. \quad (1.28)$$

Entonces, si sustituimos (1.24) en (1.23), tenemos que

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' e^{-\frac{(x-x')^2}{4Dt}} \delta(x'), \quad (1.29)$$

donde finalmente

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}. \quad (1.30)$$

Esta última expresión es la evolución temporal de la distribución de probabilidad para un ensamble de partículas Brownianas en una dimensión sin ningún confinamiento [33].

En la figura 1.2 se puede observar el comportamiento de $P(x, t)$ a diferentes valores de $\zeta \equiv \sqrt{4\pi Dt}$, adimensionalizando la función con respecto a este término. Inicialmente la distribución se comporta como una función delta, tal cual la condición inicial lo establece; posteriormente a valores pequeños de ζ , la función adquiere una forma gaussiana aumentando su ancho y disminuyendo su amplitud. Finalmente a valores muy grandes de ζ ($\zeta = 50$), la gaussiana se expande tanto al grado de parecer anularse, pero en realidad se encuentra demasiado cerca del eje x , teniendo un ancho tendiendo a ∞ y una amplitud infinitesimal. Esta gráfica corresponde a la misma obtenida por Einstein en su investigación sobre movimiento Browniano libre.

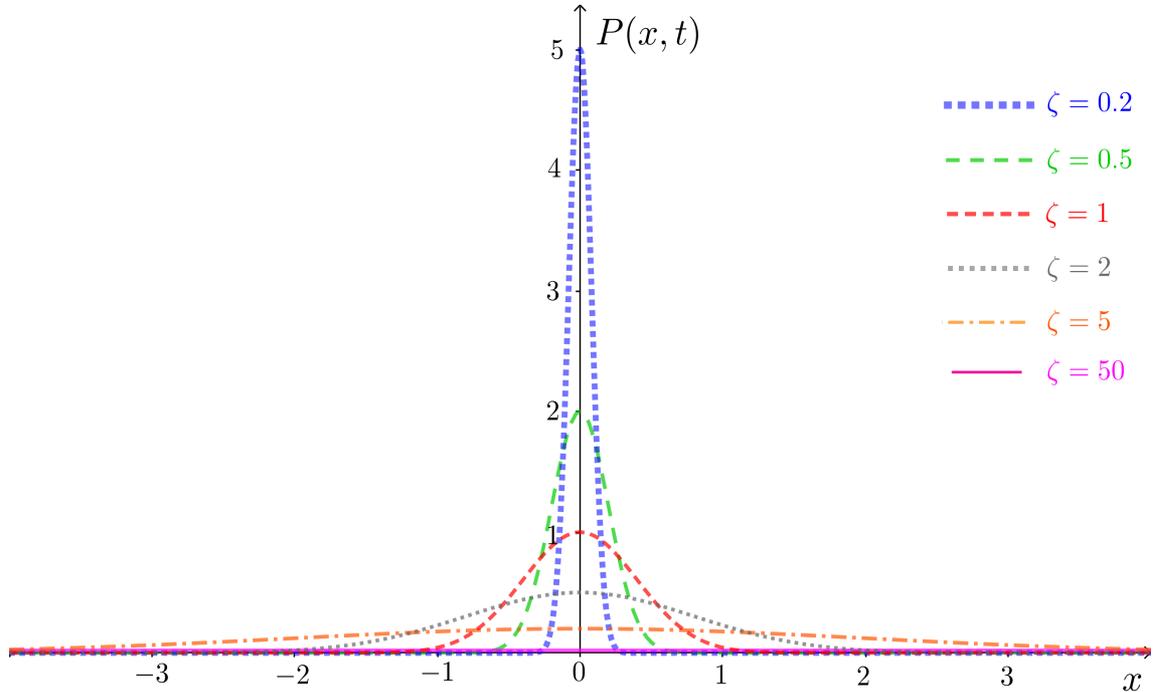


Figura 1.2: Evolución temporal de la distribución de probabilidad $P(x, t)$ para una partícula Browniana libre, adimensionalizada a diferentes valores de ζ .

Es importante resaltar que la ecuación de difusión ofrece una aproximación válida a escalas de tiempo cortas de la evolución temporal de la distribución (por el desarrollo presentado anteriormente) y a raíz de esto, el aumento del término ζ en la figura 1.2 se debe por una parte al aumento del coeficiente D y por otro al tiempo t que aumenta hasta un valor límite asintótico establecido por la aproximación. A esta escala de tiempos cortos, el movimiento de una partícula está dominado por su inercia y su desplazamiento depende del tiempo ($\Delta x = v\Delta t$), por lo que la velocidad instantánea del movimiento Browniano se puede medir como $v = \Delta x/\Delta t$. En el año 2010, la velocidad instantánea de una partícula Browniana (una microesfera de vidrio atrapada en el aire con una pinza óptica) se midió de manera muy precisa. Los datos de la velocidad verificaron la distribución de velocidad de Maxwell-Boltzmann, y el teorema de equipartición para una partícula Browniana [23].

1.2. Movimiento Activo

Uno de los más grandes paradigmas de los sistemas fuera de equilibrio es la Materia Activa. Este término surgido en la última década se ha empleado para describir a estructuras compuestas por muchos elementos biológicos o artificiales, cuya característica esencial es ser capaces de extraer energía de su entorno y convertirla en energía cinética de autopropulsión, mediante grados de libertad internos; debido a este continuo consumo de energía, estos sistemas se encuentran intrínsecamente en un estado de no equilibrio termodinámico [31]. La relevancia de estudiar este tipo de materia radica en que, al ser considerada un prototipo perfecto para construir y probar un nuevo marco teórico de los sistemas fuera de equilibrio, puede implementarse tal desarrollo en tecnologías de última generación de materia biológica a micro o nanoescala; por tanto, describir y predecir sus propiedades es crucial para lograr impactar su avance en nuestra sociedad.

La materia activa engloba sistemas en varias escalas, desde microscópicas como bacterias y partículas artificiales, hasta macroscópicas como manadas de mamíferos, aves en migración y cardúmenes de peces, entre otros más, actuando individualmente o en conjuntos tal y como se observa en la figura 1.3. Por un lado se ha observado la colectividad y propiedades emergentes en los sistemas activos macroscópicos, como lo es la autoorganización, que sólo se encuentra presente en grupos de altas concentraciones y es estudiada por el modelo de Vicsek¹⁰ [37]. Por otro lado, los sistemas activos microscópicos pueden estar constituidos por diferentes agentes como lo son organismos vivos, compuestos orgánicos y partículas artificiales; los sistemas coloidales son un ejemplo relevante a esta escala por sus múltiples aplicaciones, ya que son capaces de generar un movimiento sistemático propio dependiente o independiente del medio al que estén sujetos.

Existe una gran variedad de bacterias móviles gracias a la presencia de cilios o flagelos en su composición, donde motores proteicos responden a la concentración de sustancias químicas, ya sean sustratos alimenticios o agentes tóxicos para las bacterias; a este proceso empleado se le conoce como quimiotaxis¹¹ [29]. La propulsión flagelar de microorganismos es una de las primeras formas de motilidad y juega un papel importante en diversos entornos biológicos y ecológicos, como la propagación y control de enfermedades, así como la biodegradación de contaminantes ambientales; muchos de estos entornos son similares a líquidos y contienen partículas, polímeros u otras macromoléculas que introducen características no newtonianas en el fluido, como la viscosidad y la elasticidad de adelgazamiento por cizallamiento¹², que pueden afectar fuertemente la motilidad de los microorganismos. Como ejemplo de éstos tenemos las glicoproteínas en el moco del estómago que forman un gel viscoelástico, que ofrece una barrera eficaz contra la mayoría de los microorganismos parásitos; para superar esta barrera, la bacteria *H. pylori* excreta enzimas que transforman

¹⁰Modelo que estudia la autoorganización de este tipo de sistemas a partir de su dinámica introducida, la cual supone que una partícula se mueve a una velocidad de magnitud constante y, en cada determinado tiempo, su dirección resulta ser el promedio de las direcciones de sus primeros n vecinos más una perturbación aleatoria externa.

¹¹Movimiento originado por un gradiente de concentración química

¹²La fuerza por unidad de área que actúa sobre un líquido, la cual da como resultado un gradiente de velocidad en todo el fluido

el gel impenetrable en una solución polimérica viscosa, lo que permite que nade mejor y finalmente conduzca a infecciones persistentes; en este caso, la interacción sutil de la actividad celular y las propiedades complejas de los materiales tiene un impacto significativo en nuestra salud.

La propulsión suele provenir de otros mecanismos, como el caso de las partículas Janus [15], que depende de las propiedades físicas y químicas de su superficie para autodesplazarse; como ejemplo de este tipo de partículas se tiene a las constituidas esféricamente por aleaciones de oro y platino, las cuales mediante catálisis de oxígeno sobre agua oxigenada, provocan autodifusioforésis¹³; también se encuentran las cilíndricas sintetizadas, cuyas cubiertas están constituidas por oro y rubidio, que mediante un calentamiento local del extremo cubierto de oro por una disolución acuosa, resultan provocando termoforésis¹⁴; se tienen además las microesferas con núcleos de magnesio y las nanopartículas de oro recubiertas con óxido de titanio, que se propulsan mediante el empuje de burbujas creadas de la reacción química entre agua y magnesio, y entre agua y oro, respectivamente.

El término “partículas activas” formalmente se utiliza para referirnos a los elementos que originan el movimiento activo y son como tal un modelo idealizado de micronadadores en el que existen dos principales características que describen el comportamiento de este tipo de materia, las cuales son las partículas que pueden ser interactuantes y no interactuantes en ambientes homogéneos. De todos los ejemplos dados anteriormente, se mencionaron unos en los que sus partículas llegan a interactuar entre sí y otros en los que sus partículas sólo son activas y actúan de manera colectiva. Un ejemplo de partículas activas no interactuantes, que resulta de interés en esta investigación, son las partículas Brownianas activas, las cuales se abordan en un ambiente homogéneo y al colisionar con las partículas del medio su distribución de energía resulta ser constante.

1.2.1. Movimiento Browniano Activo

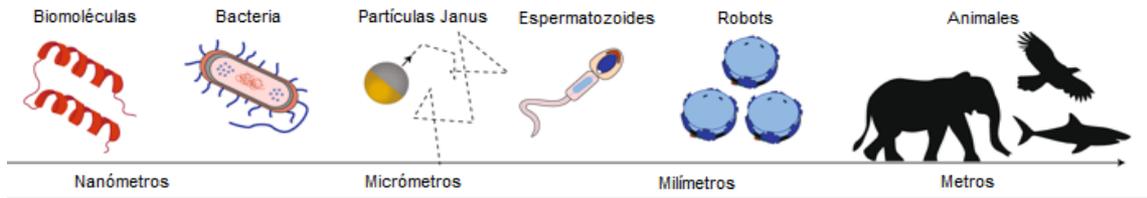
El movimiento Browniano Activo es un modelo de partículas activas no interactuantes capaces de convertir la energía disponible de su entorno, en energía cinética de autopropulsión (como ya lo hemos mencionado anteriormente), a partir de la asimetría en su forma y de sus propiedades intrínsecas. Su movimiento surge también debido a la interacción entre su propulsión y las fuerzas estocásticas traslacionales y rotacionales por parte del medio circundante; un ejemplo de este tipo de sistemas son los autopropulsores coloidales, para los cuales sus trayectorias son descritas con una velocidad constante v y con un coeficiente de difusión rotacional D_R , siendo este último el que cambia aleatoriamente la dirección de movimiento a una escala de tiempo característica $\tau_R = 1/D_R$. La propensión a trayectos rectos de una partícula se define como la longitud de persistencia de su trayectoria (en este caso $l_{\text{pers}} = v/D_R$). Como ejemplo de esto tenemos al movimiento Browniano Activo “quiral”, el cual describe la trayectoria de micronadadores que presentan helicidad, es decir,

¹³Movimiento originado por una diferencia de concentración de las mismas partículas

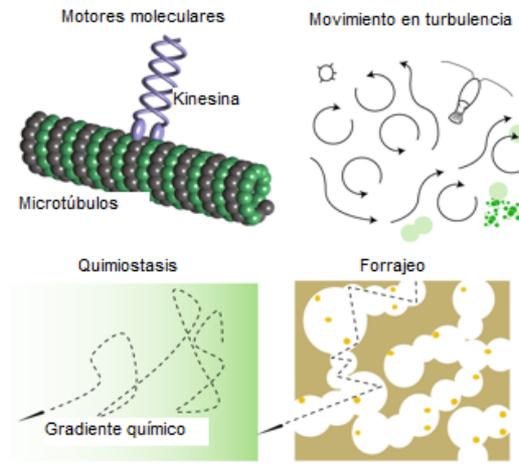
¹⁴Movimiento originado por un gradiente de temperatura

CAPÍTULO 1. ANTECEDENTES

a) Materia Activa en todas las escalas de longitud



b) Interacción con medios complejos



c) Surgimiento de comportamientos colectivos

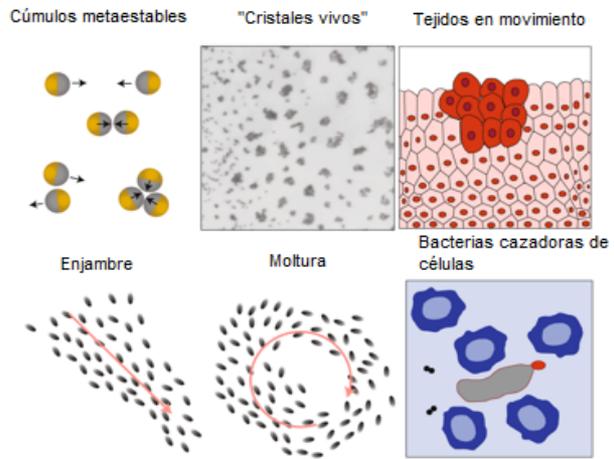


Figura 1.3: a) Diferentes tipos de sistemas de materia activa a diferentes escalas: macroscópica, mesoscópica y microscópica. b) Fenómenos debidos a la interacción de las partículas activas con el medio circundante. c) Comportamientos colectivos como consecuencia de tal interacción. *Fuente* : [10]

un movimiento rotatorio en dos dimensiones y uno de traslación en la dirección restante debido a la anisotropía¹⁵ de las partículas.

Hasta la fecha se han estudiado varios mecanismos de autopropulsión para coloides activos, entre los cuales se encuentran el movimiento inducido por reacciones químicas, por iluminación, ultrasonidos y por campos magnéticos y eléctricos aplicados. Independientemente del origen de propulsión, el escenario definido por el movimiento Browniano Activo se verificó en experimentos para una gama de microrrobots artificiales, pero a pesar de su éxito, la complejidad de algunos comportamientos

¹⁵Propiedad general de la materia a partir de la cual, propiedades como la elasticidad, temperatura, conductividad, velocidad de propagación de la luz, etc., varían según la dirección en que son examinadas.

encontrados en micronadadores biológicos implicó la necesidad de extender los desarrollos teóricos y experimentales, tales como la inclusión de dependencias espacio-temporales complejas en la velocidad de propulsión, así como en el ruido traslacional y rotacional; esto último se descubrió que sucede en sistemas donde el estímulo externo que gobierna la motilidad, no es homogéneo [36].

Recientemente se estudió de manera experimental la dinámica de partículas activas anisotrópicas no interactuantes cuya motilidad depende de su orientación; para ello se emplearon coloides activos en forma de mancuerna compuestos por un poliestireno autopropulsados sobre un sustrato plano mediante campos eléctricos alternos [24]. La posición y la orientación de la partícula se rastrearon en tiempo real y se utilizó un ciclo de retroalimentación que actualiza su velocidad con total capacidad de programación. Se encontró que se pudo corroborar el modelo teórico básico para el movimiento Browniano Activo con una velocidad dependiente de la orientación, propuesto con anterioridad. Los resultados de este trabajo arrojan nueva luz sobre las partículas Brownianas activas anisotrópicas, inspirando una mejor comprensión del comportamiento exhibido por este tipo de microorganismos cuando se someten a campos de conducción no homogéneos y nuevas ideas de diseño para micronadadores sintéticos más inteligentes [17].

El movimiento Browniano Activo difiere del movimiento “run-and-tumble” por presentar difusión rotacional, a pesar de que ambos sean modelos de micronadadores no interactuantes; también difieren en el hecho de que la dinámica “run-and-tumble” considera una tasa de cambio de dirección de las partículas como propiedad intrínseca de éstas, algo que no considera el modelo de partículas Brownianas activas [1].

1.2.2. Movimiento “run-and-tumble”

El modelo “run-and-tumble” consiste en el planteamiento de un ensamble de partículas activas que realizan caminatas aleatorias alternando carreras rectas lineales a velocidad constante de nado v (“run”), con eventos de reorientación distribuidos por Poisson llamados “tumbles” (una tasa de cambio de dirección comúnmente denominada como α); para este proceso, en las dinámicas de ruido Gaussiano, la velocidad de la partícula activa a lo largo de cada dirección fluctúa como un proceso de “Ornstein-Uhlenbeck”¹⁶, el cual resulta ser un buen modelo de partículas coloidales con esas características [22]. Este modelo dicta además la propagación y transporte de dicho ensamble, siendo el transporte descrito de manera efectiva mediante un paseo aleatorio persistente con un coeficiente de difusión efectivo activo¹⁷.

Desde el punto de vista biológico, una célula que presenta este tipo de movimiento se desplaza a partir del giro de sus múltiples flagelos helicoidales, cada uno sujeto por un gancho a un motor

¹⁶Proceso que fue propuesto por Ornstein y Uhlenbeck (1930), con el fin de modelar la velocidad del movimiento difuso de una partícula en intervalos de tiempo pequeños mientras es sometida por una fuerza externa y se encuentra bajo la influencia de fricción debida al medio.

¹⁷Coficiente de difusión definido como $D_{\text{act}} \equiv v^2/\alpha$

rotatorio. Cuando todos los motores rotativos giran en la misma dirección, la celda nada hacia adelante (“run”); cuando al menos uno de los motores invierte su orientación, la célula cambia de dirección (“tumble”).

Aunque un “tumble” reorienta la célula en una dirección aleatoria, ésta es capaz de migrar estocásticamente hacia un entorno más favorable al cambiar la frecuencia de la reorientación, dependiendo del gradiente de temperatura o concentración de moléculas de su interés (tales como azúcares, aminoácidos, dipéptidos). Dado que la motilidad está directamente relacionada con la virulencia¹⁸, comprender el papel de la reología de fluidos en la dinámica “run-and-tumble” y la propagación general de bacterias es de gran interés práctico.

La motilidad de “run-and-tumble” es ampliamente utilizada por microorganismos nadadores, incluidos numerosos organismos procariotas y eucariotas; en primera instancia este modelo fue introducido para describir la dinámica de la bacteria *E. coli* en soluciones poliméricas y últimamente se ha encontrado que pequeñas cantidades del polímero en solución pueden cambiar drásticamente la dinámica de este microorganismo [28]. En contraste, los experimentos con esta bacteria han indicado que la viscosidad de adelgazamiento por cizallamiento de las soluciones de polímeros semidiluidos, puede conducir a una mejora en su velocidad de nado. La hidrodinámica de una *E. coli* nadando es compleja debido a 1) las interacciones de un cuerpo celular y múltiples flagelos, 2) el acoplamiento traslación-rotación inducido por la forma helicoidal del flagelo y 3) la transformación polimórfica de un flagelo bajo una inversión de la rotación de un motor.

Para el desarrollo analítico de las ecuaciones que describen tal dinámica, planteamos el caso de una malla discreta en una dimensión; la separación de los puntos la denominamos como a , con etiquetado de números j y el tiempo medido en múltiplos de τ . Nos preguntamos cuál es la probabilidad $P(x, t)$ de que la partícula se encuentre en un punto $x = ja$ al tiempo $t = n\tau$. Si se considera un ensamble de partículas donde inicien en $x = 0$ a un tiempo t , la probabilidad $P(x, t)$ depende de las contribuciones de $P_R(x, t)$, que es la probabilidad de que la partícula se desplace hacia la derecha, y de $P_L(x, t)$, siendo la probabilidad de que la partícula se desplace hacia la izquierda, de modo que

$$P(x, t) = P_R(x, t) + P_L(x, t). \quad (1.31)$$

Si consideramos también a λ_R como la probabilidad de que la partícula mantenga su dirección de movimiento a la derecha y a λ_L de que la mantenga hacia la izquierda; así como también si consideramos a ν_R como la probabilidad de que la partícula cambie su dirección de movimiento hacia la izquierda cuando la partícula se mueva a la derecha y a ν_L como la probabilidad de que la partícula cambie su dirección de movimiento hacia la derecha cuando se mueva a la izquierda, de

¹⁸Grado de la capacidad de un microorganismo para producir una enfermedad.

tal manera que

$$\lambda_R + \nu_R = 1, \quad (1.32)$$

$$\lambda_L + \nu_L = 1, \quad (1.33)$$

de modo que la probabilidad de encontrarse en un punto x a un tiempo t proviniendo de la derecha, depende únicamente de la probabilidad de estar en el punto $x - a$, teniendo que

$$P_R(x, t) = \lambda_R P_R(x - a, t - \tau) + \nu_L P_L(x - a, t - \tau), \quad (1.34)$$

así como también la probabilidad de encontrarse en un punto x a un tiempo t proviniendo de la izquierda, depende únicamente de la probabilidad de estar en el punto $x + a$, teniendo a su vez que

$$P_L(x, t) = \lambda_L P_L(x + a, t - \tau) + \nu_R P_R(x + a, t - \tau). \quad (1.35)$$

Ahora, de la ecuación (1.32) hacemos lo siguiente

$$P_R(x, t) = P_R(x - a, t - \tau) + \nu_L P_L(x - a, t - \tau) - [1 - \lambda_R] P_R(x - a, t - \tau), \quad (1.36)$$

si empleamos la ecuación (1.30) a esta última, tenemos que

$$P_R(x, t) = P_R(x - a, t - \tau) + \nu_L P_L(x - a, t - \tau) - \nu_R P_R(x - a, t - \tau), \quad (1.37)$$

de donde

$$P_R(x, t) - P_R(x - a, t - \tau) = \nu_L P_L(x - a, t - \tau) - \nu_R P_R(x - a, t - \tau). \quad (1.38)$$

Por un lado, si expandemos el miembro izquierdo de esta última ecuación

$$P_R(x, t) - P_R(x - a, t - \tau) = \frac{1}{2} [P_R(x, t) - P_R(x - a, t - \tau)] + \frac{a}{2} \left[\frac{P_R(x, t) - P_R(x - a, t - \tau)}{a} \right], \quad (1.39)$$

y dividiendo todo esto entre el tiempo más corto de medición τ , algo que evidentemente se tendrá que hacer con el miembro derecho de la ecuación (1.36), tenemos que

$$\frac{P_R(x, t) - P_R(x - a, t - \tau)}{\tau} = \frac{1}{2} \left[\frac{P_R(x, t) - P_R(x - a, t - \tau)}{\tau} \right] + \frac{a}{2\tau} \left[\frac{P_R(x, t) - P_R(x - a, t - \tau)}{a} \right]; \quad (1.40)$$

si consideramos el siguiente límite, el cual significaría que consideramos el caso de una malla continua en vez de una discreta, obtenemos que

$$\begin{aligned} \lim_{\substack{\tau \rightarrow 0 \\ a \rightarrow 0}} \frac{P_R(x, t) - P_R(x - a, t - \tau)}{\tau} &= \lim_{\substack{\tau \rightarrow 0 \\ a \rightarrow 0}} \left\{ \frac{1}{2} \left[\frac{P_R(x, t) - P_R(x - a, t - \tau)}{\tau} \right] + \right. \\ &\quad \left. \frac{a}{2\tau} \left[\frac{P_R(x, t) - P_R(x - a, t - \tau)}{a} \right] \right\} = \frac{\partial}{\partial t} P_R(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} [v P_R(x, t)], \end{aligned} \quad (1.41)$$

donde

$$\lim_{\substack{\tau \rightarrow 0 \\ a \rightarrow 0}} \frac{a}{2\tau} = v. \quad (1.42)$$

Por otro lado, expandiendo el miembro derecho de la ecuación (1.35) tenemos

$$\nu_L P_L(x-a, t-\tau) - \nu_R P_R(x-a, t-\tau) = \frac{1}{2} [2\nu_L P_L(x-a, t-\tau) - 2\nu_R P_R(x-a, t-\tau)], \quad (1.43)$$

el cual lo dividimos entre τ ya que lo hicimos para el miembro izquierdo

$$\frac{\nu_L P_L(x-a, t-\tau) - \nu_R P_R(x-a, t-\tau)}{\tau} = \frac{1}{2} \left[\frac{2\nu_L}{\tau} P_L(x-a, t-\tau) - \frac{2\nu_R}{\tau} P_R(x-a, t-\tau) \right], \quad (1.44)$$

y tomamos los límites antes mencionados

$$\lim_{\substack{\tau \rightarrow 0 \\ a \rightarrow 0}} \frac{1}{2} \left[\frac{2\nu_L}{\tau} P_L(x-a, t-\tau) - \frac{2\nu_R}{\tau} P_R(x-a, t-\tau) \right] = \frac{1}{2} [\alpha_L P_L(x, t) - \alpha_R P_R(x, t)], \quad (1.45)$$

donde definimos

$$\alpha_L = \lim_{\substack{\tau \rightarrow 0 \\ a \rightarrow 0}} \frac{2\nu_L}{\tau}, \quad (1.46)$$

$$\alpha_R = \lim_{\substack{\tau \rightarrow 0 \\ a \rightarrow 0}} \frac{2\nu_R}{\tau}, \quad (1.47)$$

por lo que la ecuación (1.36), derivada a su vez de la ecuación (1.32), toma la forma

$$\frac{\partial}{\partial t} P_R(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} [v P_R(x, t)] = \frac{1}{2} [\alpha_L P_L(x, t) - \alpha_R P_R(x, t)], \quad (1.48)$$

y la ecuación (1.33) siguiendo todo este procedimiento de manera análoga, se tiene que

$$\frac{\partial}{\partial t} P_L(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} [v P_L(x, t)] = \frac{1}{2} [\alpha_R P_R(x, t) - \alpha_L P_L(x, t)]. \quad (1.49)$$

Ahora, si consideramos el caso en el que

$$v = v_i = v_i(x) \quad (1.50)$$

$$\alpha = \alpha_i = \alpha_i(x) \quad (1.51)$$

las ecuaciones (1.46) y (1.47) toman la forma

$$\frac{\partial}{\partial t} P_R(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} [v_R(x) P_R(x, t)] = \frac{1}{2} [\alpha_L(x) P_L(x, t) - \alpha_R(x) P_R(x, t)], \quad (1.52)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} P_L(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} [v_L(x) P_L(x, t)] = \frac{1}{2} [\alpha_R(x) P_R(x, t) - \alpha_L(x) P_L(x, t)], \quad (1.53)$$

siendo estas dos últimas ecuaciones una generalización de las ecuaciones de difusión planteadas para el modelo “run and tumble” en una dimensión; dichas ecuaciones se considerarán en los siguientes capítulos para nuestra investigación modificándose dependiendo el caso de interés, ya sea agregando la contribución debida a un potencial armónico de confinamiento o añadiendo algún término referente a las fluctuaciones térmicas debidas al medio, como veremos más adelante.

Capítulo 2

Movimiento Browniano y “run-and-tumble” confinados

La difusión en sistemas confinados es un tema de gran trascendencia que tiene numerosas aplicaciones prácticas y directas en sistemas naturales y artificiales de diferentes escalas. Últimamente ha despertado la curiosidad de investigadores de muchas disciplinas el avance vertiginoso de la tecnología para diseñar y caracterizar diversas microestructuras a partir del empleo de modelos que puedan, de alguna manera, predecir el comportamiento peculiar de las partículas que difunden bajo la presencia de fronteras que muy a menudo exhiben formas irregulares. Incluso se ha llegado a pensar en la posibilidad de controlar los mecanismos de transporte de muchas sustancias de interés en diferentes medios y en las situaciones más variadas, así como también poder calibrar con mayor profundidad sus asombrosas potencialidades y resaltar que el entendimiento cabal de las características de transporte en los sistemas confinados es indispensable.

A lo largo de este capítulo abordaremos sistemas tratados con anterioridad en la literatura y que son de gran relevancia en el desarrollo principal de este proyecto. En primera instancia nos enfocamos en el movimiento Browniano confinado, para el cual ya mencionamos sus características relevantes y presentamos un análisis de su distribución de probabilidad en una dimensión y sin ninguna restricción; lo que complica la deducción de dicha función son las dos constricciones contempladas para este movimiento, las cuales corresponden a 1) paredes rígidas y 2) a un potencial armónico, cuyas contribuciones son contempladas en la ecuación de difusión. Como segunda parte de este apartado se contemplan los mismos casos de confinamiento para un ensamble de partículas “run-and-tumble” estudiados a partir de ecuaciones de difusión acopladas debido a la dinámica de este tipo de agentes, logrando obtener resultados muy interesantes.

Cabe destacar desde un inicio que es de particular interés tratar el caso de confinamiento por

el potencial en el régimen sobreamortiguado, con el fin de ignorar los efectos inerciales ocasionados por esta fuerza externa; la justificación de ubicarnos en este régimen radica en contemplar al ensamble (de partículas Brownianas y “run-and-tumble”) en un fluido con un número de Reynolds bajo, donde sabemos que los micronadadores sienten en este punto una fuerza de fricción mucho mayor que la aceleración debida a la fuerza originada por el potencial.

2.1. Movimiento Browniano confinado

A pesar de que se ha observado y simulado la difusión de un ensamble de partículas Brownianas en una dimensión considerándolas sumergidas en un medio viscoso y sin ninguna restricción, resulta interesante estudiar su comportamiento, bajo las mismas condiciones, en los casos en los que dichas partículas se encuentren confinadas mediante paredes físicas o mecanismos que ejerzan una fuerza restrictiva sobre ellas, como lo sería un potencial armónico. Dicho análisis de ambos casos nos brindaría una evolución de la distribución de probabilidad de dicho ensamble en el intervalo en el que se encuentren confinadas, algo que se discute con gran detalle a continuación.

Una vez que se estableció la base molecular del movimiento browniano y de la difusión, se pudieron deducir mayores resultados que podían describir la concentración de las partículas en un instante y lugar determinados como una consecuencia de la naturaleza atómica de la materia; sin embargo, para encontrar la solución de la ecuación de difusión se necesita una condición inicial y condiciones a la frontera. El primer tratamiento moderno para resolver la ecuación de difusión se halla en la obra de Fourier de 1822 dentro del contexto de la conducción del calor [5]; en ese trabajo se pueden encontrar varios problemas resueltos con el método de las series trigonométricas. También desde entonces se sabe que en el estado estacionario la ecuación de difusión es una ecuación en derivadas parciales que comúnmente aparece en numerosos problemas tanto de la mecánica, la hidrodinámica o de la electrostática, la conocida ecuación de Laplace. En cuanto a dicha ecuación de difusión, muchos prominentes matemáticos notaron la relevancia de las condiciones de la frontera para poder encontrar su solución matemática [20]. Lo anterior es importante porque ahora se sabe que esta ecuación no puede resolverse analíticamente para cualquier condición inicial y bajo condiciones de frontera que no sean “simples”. Por decir algo, los problemas que se han resuelto exitosamente desde tiempos de Fourier y que se encuentran desarrollados en algunos de los tratados sobre difusión más influyentes del siglo XX, como los redactados por Horatio Carslaw (1870-1954), John C. Jaeger (1907-1979) [9], y más recientemente por John Crank (1915-2006) [11], corresponden a los que modelan la difusión en sistemas que se encuentran en el estado estacionario y/o que poseen geometría cilíndrica, esférica o rectangular. Por otra parte, la difusión a través de medios porosos también es un problema de confinamiento donde las fronteras del sistema que definen la región por donde pueden difundir las partículas son extremadamente complicadas.

2.1.1. Confinamiento por paredes rígidas

Como se mencionó anteriormente, es de gran interés conocer una expresión analítica de la densidad de probabilidad $P(x, t)$ de encontrar a la partícula en cierta posición x a un tiempo dado t , para este caso más simple de confinamiento en el que se considera una partícula pasiva Browniana confinada por dos paredes rígidas impermeables en una dimensión. Para ello, recurrimos a la ecuación de difusión en una dimensión dada en (2.1), con fronteras en $x = 0$ y $x = L$, si tomamos como L la longitud del intervalo de confinamiento [33]

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

Recordemos que dicha densidad de probabilidad se encuentra estrechamente relacionada con la corriente de probabilidad mediante la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x, t) + \frac{\partial}{\partial x}J(x, t) = 0. \quad (2.2)$$

Por ello, es importante mencionar que la ecuación (2.1) se encuentra sujeta a las siguientes condiciones de frontera

$$J(0, t) = J(L, t) = 0, \quad (2.3)$$

las cuales al decir que la corriente o flujo de probabilidad es cero en las fronteras de la caja, establecen que dichas paredes son rígidas sin dar lugar a ningún proceso de transmisión, por lo que la partícula Browniana permanecerá confinada en dicho intervalo. Por simplicidad consideramos la siguiente condición inicial

$$P(x, t = 0) = \delta(x - x_0), \quad (2.4)$$

que corresponde a que la partícula Browniana parte en $x = x_0$, con $0 < x_0 < L$. Podemos observar que lo planteado en (2.3) y (2.4) es suficiente para dar lugar a la siguiente condición de normalización

$$\int_0^L P(x, t = 0) dx = 1, \quad (2.5)$$

la cual nos dice que la probabilidad de encontrar a la partícula Browniana en todo el intervalo es 1.

Una vez planteadas las condiciones a las que están sujetas este caso de confinamiento, procedemos a resolver la ecuación (2.1) mediante separación de variables; consideramos a la densidad de probabilidad $P(x, t)$ como un producto de funciones

$$P(x, t) = f(t)g(x), \quad (2.6)$$

y sustituimos dicho producto en la ecuación de difusión

$$\frac{\dot{f}}{f} = D \frac{g''}{g}, \quad (2.7)$$

denotando la *prima* y el *punto* como la diferenciación espacial y temporal, respectivamente. Posteriormente igualamos la ecuación (2.7) a una constante en ambos lados de la ecuación. Esta igualación se toma como negativa para conformar el hecho de que la densidad de probabilidad decae con el tiempo. Por tanto, las funciones de una sola variable satisfacen que

$$\dot{f} = -kf, \quad (2.8)$$

$$Dg'' = -kg, \quad (2.9)$$

con $k = cte$. Las soluciones a la ecuación espacial (2.9), que satisfacen las condiciones de frontera dadas en (2.3), son de la forma

$$\cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad (2.10)$$

con n entero. Esta solución es de dicha forma ya que si consideramos la ecuación de continuidad (2.2) y la sustituimos en la ecuación (2.1), tenemos que

$$\frac{\partial}{\partial x}J(x, t) = D\frac{\partial^2}{\partial x^2}P(x, t), \quad (2.11)$$

donde

$$J(x, t) = D\frac{\partial}{\partial x}P(x, t), \quad (2.12)$$

de modo que (2.10) cumple las condiciones de frontera a partir de (2.12)

$$J(x = 0, t) = D\frac{\partial}{\partial x}P(x, t)\Big|_{x=0} = -\frac{Dn\pi}{L}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\Big|_{x=0} = 0, \quad (2.13)$$

$$J(x = L, t) = D\frac{\partial P(x, t)}{\partial x}\Big|_{x=L} = -\frac{Dn\pi}{L}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\Big|_{x=L} = 0. \quad (2.14)$$

Ahora, ya que dicha solución (2.10) satisface las condiciones de frontera, procedemos a sustituirla en la ecuación (2.9) con el fin de conocer una expresión para la constante k , teniendo que

$$-D\left[\frac{n\pi}{L}\right]^2\cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = -k\cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad (2.15)$$

donde

$$k = D\left[\frac{n\pi}{L}\right]^2. \quad (2.16)$$

Por esto último, la solución para la ecuación temporal (2.8) es un decaimiento exponencial, con una velocidad de decaimiento igual a

$$k_n = D\left[\frac{n\pi}{L}\right]^2, \quad (2.17)$$

para el n -ésimo eigenmodo espacial.

En general, la solución a la ecuación de difusión puede ser escrita como la expansión de eigenfunciones

$$P(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) e^{-\left[\frac{n\pi}{L}\right]^2 Dt}, \quad (2.18)$$

donde los coeficientes A_n son determinados por la condición inicial, ya que las funciones $\cos(n\pi x/L)$ son un conjunto completo de estados para las condiciones de frontera dadas.

Si consideramos la condición inicial dada en (2.4), a partir de (2.18) tenemos que

$$P(x, t = 0) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = \delta(x - x_0), \quad (2.19)$$

donde al multiplicar ambos lados de la ecuación por el término $\cos(m\pi x/L)$ e integramos en todo el intervalo de confinamiento, tenemos que

$$\int_0^L \sum_{n=0}^{\infty} A_n \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \cos\left(\frac{m\pi x}{L}\right) dx = \int_0^L \delta(x - x_0) \cos\left(\frac{m\pi x}{L}\right) dx, \quad (2.20)$$

Observamos que el lado derecho de la ecuación (2.20) cumple que

$$\int_0^L \delta(x - x_0) \cos\left(\frac{m\pi x}{L}\right) dx = \cos\left(\frac{m\pi x_0}{L}\right), \quad (2.21)$$

ya que satisface la siguiente propiedad de la función delta,

$$\int_a^b f(x) \delta(x - x_0) dx = \begin{cases} f(x_0) & \text{si } x_0 \in [a, b] \\ 0 & \text{si } x_0 \notin [a, b] \end{cases} \quad (2.22)$$

si consideramos $a < b$ con $a, b \in \mathbb{R}$, porque $x_0 \in [0, L]$. Por otro lado, el miembro izquierdo de (2.20) al satisfacer la propiedad de ortogonalidad de las funciones coseno, obtenemos que

$$\sum_{n=0}^{\infty} A_n \int_0^L \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \cos\left(\frac{m\pi x}{L}\right) dx = \sum_{n=0}^{\infty} A_n [L\delta_{nm}]; \quad (2.23)$$

por tanto

$$\sum_{n=0}^{\infty} A_n [L\delta_{nm}] = A_m L. \quad (2.24)$$

Así que, igualando este último resultado con (2.21)

$$A_m L = \cos\left(\frac{m\pi x_0}{L}\right) \quad (2.25)$$

donde finalmente

$$A_m = \frac{1}{L} \cos\left(\frac{m\pi x_0}{L}\right); \quad (2.26)$$

debido a que $n, m \in \mathbb{N} \cup \{0\}$, podemos decir que

$$A_n = \frac{1}{L} \cos\left(\frac{n\pi x_0}{L}\right). \quad (2.27)$$

Por tanto, la solución de la ecuación de difusión a partir de la condición inicial y las condiciones de frontera discutidas en un inicio, es la siguiente

$$P(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{L} \cos\left(\frac{n\pi x_0}{L}\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) e^{-\left[\frac{n\pi}{L}\right]^2 Dt}, \quad (2.28)$$

donde cada eigenmodo decae exponencialmente en el tiempo, con un tiempo de decaimiento numéricamente diferente dado por

$$\tau_n = k_n^{-1} = L^2/n^2\pi^2 D. \quad (2.29)$$

Podemos notar que si consideramos el límite en el que $t \rightarrow \infty$ para la densidad de probabilidad dada en (2.28) (límite estacionario), tenemos que

$$P(x) = \frac{1}{L}. \quad (2.30)$$

Con el fin de analizar la expresión (2.28) de manera gráfica, procedemos a adimensionalizarla con respecto a la longitud de la caja, diciendo así que $x_0/L \in [0, 1]$, S.P.G. considerando $x_0/L = 0,5$ y, haciendo $q = Dt/L^2$ como nuestra variable adimensional asociada al tiempo, de modo que observamos la evolución de $P(x, t)$ con respecto a diferentes valores de q .

En la figura 2.1 consideramos la evolución temporal de $P(x, t)$, donde podemos observar que ya a un valor $q = 10$ la distribución de probabilidad es la estacionaria dada en (2.30), en la que $q \rightarrow \infty$. También podemos observar que la distribución de probabilidad $P(x, t)$ inicialmente se comporta como una función delta, ya que la partícula Browniana parte desde $x_0 = 0,5$. Posteriormente dicha distribución se va comportando como una gaussiana en el intervalo de confinamiento definido por la caja, hasta que finalmente a tiempos muy largos (en el límite estacionario) se comporta como una constante, diciendo así que la probabilidad de encontrar a la partícula en cualquier punto dentro de la caja es la misma, tal como se menciona en (2.30).

Lo que ocurre físicamente es que el ensamble permanece en el centro de la caja unidimensional y conforme avanza el tiempo, las partículas se distribuyen en todo el espacio hasta que en el régimen estacionario se distribuyen uniformemente; esto se debe a que estamos confinando partículas pasivas que actúan colectivamente, de modo que no existe repulsión entre ellas, no poseen ninguna velocidad de nado propia ni alguna propiedad intrínseca de desplazamiento.

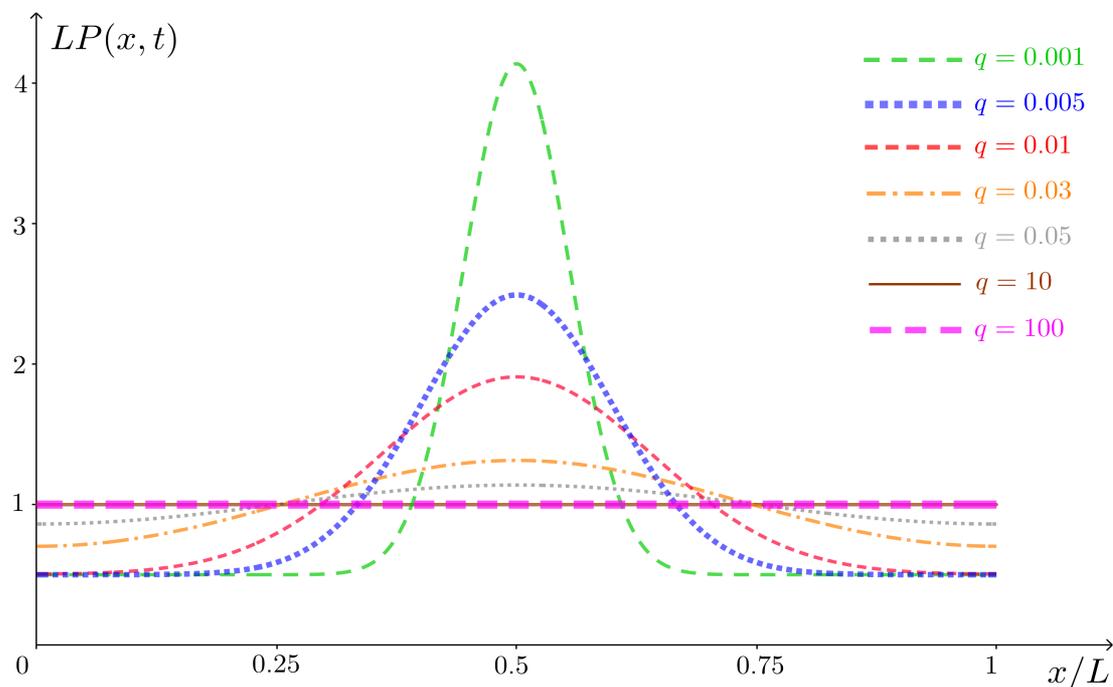


Figura 2.1: Evolución temporal de la distribución de probabilidad $P(x, t)$ adimensionalizada a diferentes valores de q .

2.1.2. Confinamiento por un potencial armónico.

De acuerdo a lo mencionado anteriormente, recordemos que un proceso de Ornstein-Uhlenbeck es un proceso estocástico que describe el comportamiento de una partícula Browniana que se encuentra sometida a una fuerza externa y bajo la influencia de fricción debida al medio en el que se encuentra; todo esto en el límite sobreamortiguado. Dichas condiciones del sistema físico que involucra tal proceso son las que consideraremos en esta sección, para una partícula Browniana sobreamortiguada confinada por un potencial armónico.

Sabemos que la ecuación de movimiento empleada para estudiar el movimiento Browniano en una dimensión es la ecuación de Fokker-Planck, la cual para una función de distribución $W(y, t)$ con y una variable estocástica está dada por

$$\frac{\partial}{\partial t} W(y, t) = L_{FP} W(y, t), \quad (2.31)$$

donde

$$L_{FP}(y) = -\frac{\partial}{\partial y}D^{(1)}(y) + \frac{\partial^2}{\partial y^2}D^{(2)}(y). \quad (2.32)$$

Para un proceso de Ornstein-Uhlenbeck el coeficiente de *deriva* ($D^{(1)}$) es lineal y el coeficiente de difusión ($D^{(2)}$) es constante, de modo que

$$D^{(1)}(y) = -\gamma y, \quad (2.33)$$

$$D^{(2)}(y) = D = \text{const}, \quad (2.34)$$

siendo γ una variable que depende del tiempo y de la forma del potencial ($[\gamma] = s^{-1}$). Obtenemos así la siguiente ecuación de F-P

$$\frac{\partial}{\partial t}W = \gamma \frac{\partial}{\partial y}(yW) + D \frac{\partial^2}{\partial y^2}W. \quad (2.35)$$

Por otro lado, sabemos que la ecuación de Smoluchowski es un caso particular de la ecuación de F-P en una dimensión, que describe el movimiento de una partícula Browniana en un potencial $f(x)$ en el límite de alta fricción (sobreamortiguado) bajo el efecto de fluctuaciones térmicas debidas al medio, donde los coeficientes de *deriva* y de difusión están dados por

$$D^{(1)}(x) = (m\nu)^{-1}F(x) = -(m\nu)^{-1}f'(x), \quad (2.36)$$

$$D^{(2)}(x) = k_B T (m\nu)^{-1}, \quad (2.37)$$

donde $F(x) = -f'(x)$ es la fuerza debida al potencial $f(x)$, T es la temperatura, m es la masa de la partícula, $\nu \equiv 1/\mu m$, donde $[\nu] = s^{-1}$, siendo μ la movilidad de la partícula en el medio y k_B es la constante de Boltzmann. Por tanto dicha ecuación de Smoluchowski es de la forma

$$\frac{\partial}{\partial t}P = \frac{1}{m\nu} \left[\frac{\partial}{\partial x}f'(x) + k_B T \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] P. \quad (2.38)$$

Podemos observar que la ecuación asociada al proceso de Ornstein-Uhlenbeck es idéntica a la ecuación de Smoluchowski si consideramos a la función de distribución $W(y, t)$ como la densidad de probabilidad $P(x, t)$, con $y = x$ donde x es la posición de la partícula; además considerando como potencial el de un oscilador armónico, dado por

$$f(x) = \frac{1}{2}mw_0^2x^2, \quad (2.39)$$

donde

$$f'(x) = mw_0^2x, \quad (2.40)$$

teniendo así que

$$D^{(1)}(x) = -\gamma x = -\frac{w_0^2}{\nu} x, \quad (2.41)$$

$$D^{(2)}(x) = D = \frac{k_B T}{m\nu}, \quad (2.42)$$

y resultando la ecuación de F-P

$$\frac{\partial}{\partial t} P = \gamma \frac{\partial}{\partial x} (xP) + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P. \quad (2.43)$$

Con esto cabe destacar nuevamente que nuestro propósito en este apartado es encontrar una expresión para la distribución de probabilidad de encontrar a una partícula Browniana en un punto x a un tiempo dado t confinada por un potencial armónico de la forma (2.39). Por tanto, es importante considerar una condición inicial para dicha distribución $P(x, t)$ como

$$P(x, t = 0) = \delta(x - x_0), \quad (2.44)$$

y una condición de frontera dada por

$$P(x = \pm\infty, t) = 0, \quad (2.45)$$

la cual establece que la distribución decae lo suficientemente rápido como para que se anule cuando $x \rightarrow \pm\infty$.

Procediendo a resolver la ecuación (2.43), podemos aplicar transformada de Fourier (1.15) con respecto a x , a la distribución de probabilidad $P(x, t)$ por la condición de frontera (2.45), obteniendo así la ecuación de F-P para el proceso de O-U en el espacio de Fourier

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{P} = -\gamma k \frac{\partial}{\partial k} \hat{P} - Dk^2 \hat{P}. \quad (2.46)$$

Observamos que la transformada de Fourier de la condición inicial (2.44) está dada por

$$\hat{P}(k, t = 0) = e^{-ikx_0}. \quad (2.47)$$

La ecuación resultante en (2.46) puede ser resuelta por el método de las características empleando la condición inicial (2.47) como se muestra en (A.1) del Apéndice, obteniendo así la solución

$$\hat{P}(k, t) = \exp[-ikx_0 e^{-\gamma t} - Dk^2(1 - e^{-2\gamma t})/2\gamma], \quad (2.48)$$

donde aplicando transformada de Fourier inversa a la expresión (2.48), cuya álgebra se muestra en (A.1.1) del Apéndice, obtenemos que

$$P(x, t) = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi D(1 - e^{-2\gamma t})}} \exp\left[-\frac{\gamma(x - e^{-\gamma t}x_0)^2}{2D(1 - e^{-2\gamma t})}\right]. \quad (2.49)$$

Si consideramos el límite cuando $t \rightarrow \infty$ para la distribución de probabilidad obtenida en (2.49) (caso estacionario), vemos que ésta es de la forma

$$P(x) = P(x, t \rightarrow \infty) = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi D}} \exp\left[-\frac{\gamma x^2}{2D}\right]. \quad (2.50)$$

Con el propósito de analizar la expresión (2.49), procedemos a reescribir ésta de la siguiente manera

$$P(x, t) = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi D}} \frac{1}{\sqrt{1 - e^{-2\gamma t}}} \exp\left[-\frac{\gamma(x - e^{-\gamma t}x_0)^2}{2D(1 - e^{-2\gamma t})}\right], \quad (2.51)$$

en la que para adimensionalizarla, como en el caso anterior de una partícula confinada por una caja, denominamos a $u = \gamma t$ como unidad adimensional asociada al tiempo y $\xi = \sqrt{2\pi D/\gamma}$, observando que esta última al tener unidades de longitud se emplea para adimensionalizar x y a $P(x, t)$. También sin pérdida de generalidad elegimos que la partícula Browniana parta en $x_0 = 5$.

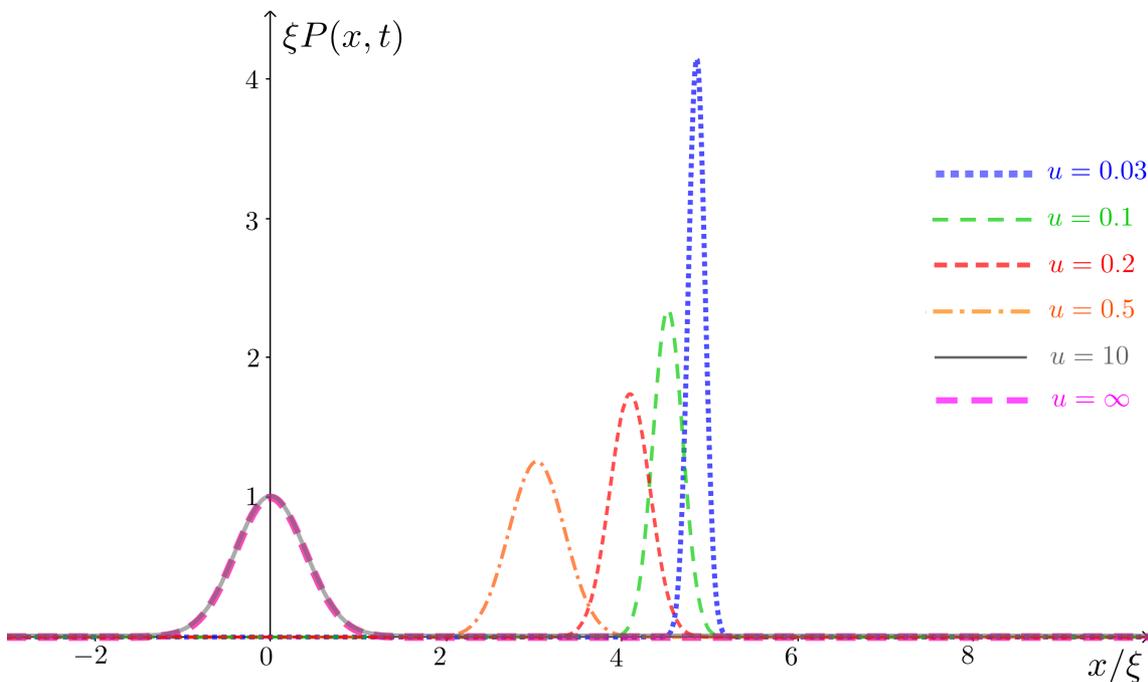


Figura 2.2: Evolución temporal a diferentes valores de u de la distribución de probabilidad $P(x, t)$.

En la figura 2.2 podemos observar la evolución temporal de la distribución $P(x, t)$ a diferentes valores de u , percatándonos de que ya a un valor mucho mayor ($u = 10$) con respecto a los primeros valores de esta variable dependiente del tiempo, la distribución se comporta como la estacionaria encontrada en (2.50), en la que $u \rightarrow \infty$. La distribución de probabilidad sabemos que inicialmente se comporta como una función delta ya que la partícula Browniana se encuentra situada en un punto, pero dicha función posteriormente lo hace como una gaussiana al transcurrir el tiempo, aumentando su ancho progresivamente; finalmente a tiempos muy largos, es decir en el límite estacionario, podemos observar que la distribución sigue teniendo la forma de una gaussiana cuyo ancho llega a un límite definido.

Analizando la física involucrada en lo obtenido en la figura 2.2, observamos que el ensamble de partículas activas permanece en x_0 ya que así lo establece la condición inicial, posteriormente conforme avanza el tiempo las partículas al actuar de manera colectiva, describen una distribución de probabilidad gaussiana, de modo que poco a poco el conjunto se ve más atraído por el potencial que se encuentra centrado en $x = 0$, hasta que en el régimen estacionario permanecen confinadas en ese punto.

2.2. Movimiento “run-and-tumble” confinado

Es bien sabido que la materia activa tiene la propiedad de acumularse en las fronteras cuando se encuentra en ambientes confinados bajo ciertos regímenes específicos; sin embargo, no siempre es así para el caso de partículas activas “run-and-tumble” y por ello a continuación presentamos casos de confinamiento para un conjunto de éstas estudiados desde las ecuaciones de difusión.

Por un lado se analiza el problema de confinamiento por una caja unidimensional limitada por paredes rígidas; en este caso, se considera su dinámica que involucra su velocidad de nado y su tasa de cambio de dirección, así como también la acumulación de estos agentes en las paredes por su movimiento persistente, hasta el punto en el que realicen un “tumble” y cambien de dirección de nado alejándose de la frontera. Al introducir condiciones de contorno adecuadas, investigamos las soluciones del problema centrándonos en la distribución de probabilidad de los nadadores. Debido a la complejidad del análisis, resultó conveniente estudiar a la función en el espacio de Laplace, comparando en el límite efectivo dicho resultado con la transformada de Laplace de la distribución de probabilidad obtenida para un ensamble de partículas Brownianas confinadas por la misma caja.

Por otro lado, se aborda el confinamiento por un potencial armónico de este ensamble de partículas activas ofreciendo un resultado interesante en el régimen estacionario para la distribución, el cual resulta elemental en nuestro posterior desarrollo.

2.2.1. Confinamiento por paredes rígidas

En este apartado, como en los anteriores para movimiento Browniano, nuestro objetivo es encontrar una expresión para la distribución de probabilidad $P(x, t)$ de encontrar a una partícula “run-and-tumble” en un punto x a cierto tiempo dado t confinada por una caja en una dimensión. Recordamos que $v_i(x)$ ($i = R, L$) es la velocidad de nado de la partícula debida a su autopropulsión y $\alpha_i(x)$ ($i = R, L$) es la tasa de cambio de dirección de ésta, la cual es una característica fundamental de este tipo de partículas. Por simplicidad tomamos en cuenta que

$$v = v_i(x) = cte, \quad (2.52)$$

$$\alpha = \alpha_i(x) = cte, \quad (2.53)$$

con $i = R, L$. Dicha función estocástica, conformada por las distribuciones de probabilidad de la partícula de orientarse hacia la derecha ($P_R(x, t)$) y de orientarse hacia la izquierda ($P_L(x, t)$), puede ser obtenida de las ecuaciones (1.47) y (1.48) considerando las expresiones (2.52) y (2.53), teniendo que

$$\frac{\partial}{\partial t} P_R(x, t) = -v \frac{\partial}{\partial x} P_R(x, t) - \frac{\alpha}{2} [P_R(x, t) - P_L(x, t)], \quad (2.54)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} P_L(x, t) = v \frac{\partial}{\partial x} P_L(x, t) + \frac{\alpha}{2} [P_R(x, t) - P_L(x, t)], \quad (2.55)$$

las cuales corresponden a ser las ecuaciones de difusión que describen la dinámica de la partícula “run-and-tumble” de manera estadística. A partir de éstas se deducen las ecuaciones acopladas para la distribución de probabilidad *total* $P(x, t) \equiv P_R(x, t) + P_L(x, t)$ y para la corriente de probabilidad $J(x, t) \equiv v[P_R(x, t) - P_L(x, t)]$

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} J(x, t) = 0, \quad (2.56)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} J(x, t) + v^2 \frac{\partial}{\partial x} P(x, t) + \alpha J(x, t) = 0, \quad (2.57)$$

donde la ecuación (2.56) corresponde a la ecuación de continuidad y resulta a partir de la suma de (2.54) y (2.55), mientras que la ecuación (2.57) se deduce a partir de derivar la expresión para $J(x, t)$ con respecto al tiempo y en ella sustituir las ecuaciones (2.54) y (2.55), como se muestra a continuación

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} J(x, t) = v \frac{\partial}{\partial t} [P_R - P_L] &= v \left(-v \frac{\partial}{\partial x} P_R(x, t) - \frac{\alpha}{2} [P_R(x, t) - P_L(x, t)] \right. \\ &\quad \left. - v \frac{\partial}{\partial x} P_L(x, t) - \frac{\alpha}{2} [P_R - P_L] \right) = -v^2 \frac{\partial}{\partial x} P(x, t) - \alpha J(x, t). \end{aligned} \quad (2.58)$$

Ahora, procedemos a derivar con respecto a x la ecuación (2.57) y en ella sustituir la ecuación de continuidad (2.56), teniendo que

$$\frac{\partial^2}{\partial x \partial t} J(x, t) + \alpha \frac{\partial}{\partial x} J(x, t) + v^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t) = 0, \quad (2.59)$$

donde

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \alpha\right) \frac{\partial}{\partial x} J(x, t) + v^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t) = 0, \quad (2.60)$$

lo que implica que

$$-\left(\frac{\partial}{\partial t} + \alpha\right) \frac{\partial}{\partial t} P(x, t) + v^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t) = 0. \quad (2.61)$$

Esta ecuación resultante de desacoplar (2.56) y (2.57), es la que resolveremos con el fin de obtener una expresión analítica de $P(x, t)$ y para ello consideramos fronteras de confinamiento en $x = a$ y $x = b$, asumiendo S.P.G. que $a < 0 < b$. [2] Debido a su movimiento persistente, las partículas al aproximarse a cualquiera de las dos fronteras, ejercen presión contra el muro hasta el momento en el que un *tumble* llega a cambiar su dirección de movimiento, dando lugar a la acumulación de partículas en dichos muros, algo que se espera observar al analizar el comportamiento de la distribución de probabilidad $P(x, t)$ de manera gráfica. Es importante considerar que las propiedades de cambio de dirección de los *nadadores* no se vean afectadas por la presencia del muro, sin embargo cabe mencionar que una bacteria real podría en cambio manifestar una dependencia no trivial de tasas de cambio al aproximarse a las fronteras.

También, con el fin de implementar condiciones de frontera debido a la presencia de los muros rígidos, denominemos a $W_a(t)$ y $W_b(t)$ como las probabilidades de encontrar partículas atrapadas en los puntos de frontera a y b al tiempo t , respectivamente; esto por lo mencionado anteriormente de que estas partículas activas por su movimiento persistente tienden a acumularse en las fronteras, como se puede observar en la figura 2.3. Dichas probabilidades generan las siguientes condiciones de frontera

$$vP_L(b, t) = \frac{\alpha}{2} W_b(t) \quad (2.62)$$

$$vP_R(a, t) = \frac{\alpha}{2} W_a(t), \quad (2.63)$$

obtenidas a partir de la suposición de que el flujo hacia la izquierda (derecha) de partículas en el punto fronterizo derecho (izquierdo) es generado por la fracción de partículas atoradas en ese punto que invierten su dirección de movimiento.

Como perspectiva, es importante mencionar que los términos W_i con $i = a, b$, satisfacen la siguiente condición de normalización

$$\int_a^b P(x, t) dx + W_a(t) + W_b(t) = 1. \quad (2.64)$$

Y que si evaluamos la ecuación de continuidad en las fronteras, se tiene que

$$\frac{\partial}{\partial t} W_b(t) = J(b, t), \quad (2.65)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} W_a(t) = -J(a, t). \quad (2.66)$$

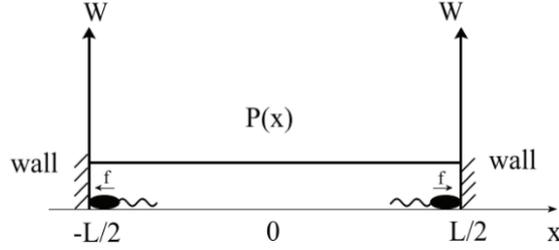


Figura 2.3: Esquema del problema de partículas “run-and-tumble” confinadas por paredes rígidas en una dimensión. El perfil de densidad muestra su aumento en los extremos por la acumulación de los nadadores en las fronteras y su comportamiento uniforme dentro de la caja, en el régimen estacionario. *Fuente* : [2]

Asumimos que al tiempo inicial $t = 0$, las partículas se concentran en el origen ($x = 0$) y son igualmente distribuidas hacia la derecha e izquierda, de modo que como condición inicial establecemos que

$$P(x, 0) = \delta(x), \quad (2.67)$$

donde observamos también que al tiempo inicial

$$\begin{aligned} J(x, 0) &= 0, \\ W_a(0) &= W_b(0) = 0. \end{aligned} \quad (2.68)$$

Finalmente, para resolver la ecuación (2.61), procedemos a aplicarle la transformada de Laplace, la cual sabemos que está dada por

$$\tilde{P}(x, s) = \int_0^\infty e^{-ts} P(x, t) dt, \quad (2.69)$$

donde para el término $\partial^2 P / \partial t^2$ se tiene que

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{-ts} \frac{\partial^2}{\partial t^2} P(x, t) dt &= e^{-ts} \frac{\partial}{\partial t} P \Big|_0^\infty + s \int_0^\infty e^{-ts} \frac{\partial}{\partial t} P dt = 0 + s \int_0^\infty e^{-ts} \frac{\partial}{\partial t} P dt = \\ &= s \left(e^{-ts} P \Big|_0^\infty + s \int_0^\infty e^{-ts} P dt \right) = -s\delta(x) + s^2 \tilde{P}(x, s), \end{aligned} \quad (2.70)$$

y para el término $\partial P / \partial t$

$$\int_0^\infty dt e^{-ts} \frac{\partial}{\partial t} P = e^{-ts} P \Big|_0^\infty + s \int_0^\infty dt e^{-ts} P = -\delta(x) + s \tilde{P}(x, s), \quad (2.71)$$

para los cuales se considera la condición inicial (2.67). Por tanto, la ecuación (2.61) en el dominio de Laplace es de la siguiente forma

$$v^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{P} - s(s + \alpha) \tilde{P} = -(s + \alpha) \delta(x), \quad (2.72)$$

cuya solución está dada por

$$\tilde{P} = A_1 e^{c|x|} + A_2 e^{-c|x|}, \quad (2.73)$$

si consideramos en ésta que

$$v^2 c^2(s) = s[s + \alpha], \quad (2.74)$$

tomando la forma

$$v^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{P} - v^2 c^2 \tilde{P} = -\frac{v^2 c^2}{s} \delta(x). \quad (2.75)$$

Ahora, es importante decir que debido a que nos encontramos en el dominio de Laplace, se deben establecer las condiciones de frontera adecuadas para P y lo hacemos de la siguiente manera. Si sustituimos la expresión (2.65) en (2.62), se tiene que

$$v \frac{\partial}{\partial t} P_L \Big|_b = \frac{\alpha}{2} J(b, t), \quad (2.76)$$

la cual al sustituirla en la expresión (2.59) evaluada en $x = b$, obtenemos

$$\frac{\partial}{\partial t} J \Big|_b + v^2 \frac{\partial}{\partial x} P \Big|_b + \alpha \left(\frac{2v}{\alpha} \frac{\partial}{\partial t} P_L \Big|_b \right) = 0, \quad (2.77)$$

donde si empleamos la definición de $J(x, t)$, nos resulta que

$$v \frac{\partial}{\partial t} [P_R - P_L] \Big|_b + v^2 \frac{\partial}{\partial x} P \Big|_b + 2v \frac{\partial}{\partial t} P_L \Big|_b = 0, \quad (2.78)$$

y si consideramos la definición de $P(x, t)$ en términos de P_R y P_L , tenemos que

$$v \frac{\partial}{\partial t} [P - 2P_L] \Big|_b + v^2 \frac{\partial}{\partial x} P \Big|_b + 2v \frac{\partial}{\partial t} P_L \Big|_b = 0, \quad (2.79)$$

obteniendo finalmente

$$\frac{\partial}{\partial t} P \Big|_b = -v \frac{\partial}{\partial x} P \Big|_b, \quad (2.80)$$

expresión que al aplicarle transformada de Laplace, nos resulta la primera condición de frontera para \tilde{P} en $x = b$, dada por

$$v \frac{\partial}{\partial x} \tilde{P} \Big|_b = -s \tilde{P} \Big|_b. \quad (2.81)$$

Para la otra condición de frontera para \tilde{P} en $x = a$, se realiza un planteamiento similar a partir de sustituir la expresión (2.66) en (2.63) y a su vez en (2.57) evaluada en dicho punto; posteriormente al emplear las definiciones de $J(x, t)$ y de $P(x, t)$, nos resulta que

$$\left. \frac{\partial P}{\partial t} \right|_a = v \left. \frac{\partial P}{\partial t} \right|_a \quad (2.82)$$

donde al aplicar finalmente transformada de Laplace, tenemos la condición de frontera

$$v \left. \frac{\partial \tilde{P}}{\partial x} \right|_a = s \tilde{P}|_a. \quad (2.83)$$

Entonces, si empleamos las condiciones de frontera (2.81) y (2.83) para la solución (2.73), considerando una situación de simetría en la que $|b| = |a| = L/2$, siendo L la longitud de la caja, nos resulta el siguiente sistema de una sola ecuación

$$A_1(cv + s)e^{c\frac{L}{2}} - A_2(cv - s)e^{-c\frac{L}{2}} = 0, \quad (2.84)$$

el cual al resolverlo obtenemos una expresión para los coeficientes A_1 y A_2

$$A_1 = \frac{\left(\frac{c}{2s}\right) [vc - s]e^{-c\frac{L}{2}}}{(s + vc)e^{c\frac{L}{2}} - (vc - s)e^{-c\frac{L}{2}}}, \quad (2.85)$$

$$A_2 = \frac{\left(\frac{c}{2s}\right) [vc + s]e^{c\frac{L}{2}}}{(s + vc)e^{c\frac{L}{2}} - (vc - s)e^{-c\frac{L}{2}}}, \quad (2.86)$$

donde si sustituimos dichos coeficientes en la solución (2.73), tenemos que

$$\tilde{P}(x, s) = \frac{c}{2s[(s + vc)e^{c\frac{L}{2}} - (vc - s)e^{-c\frac{L}{2}}]} [(vc - s)e^{-c\frac{L}{2} + c|x|} + (vc + s)e^{c\frac{L}{2} - c|x|}]; \quad (2.87)$$

en la que si empleamos el cambio dado en (2.74), llegamos a la siguiente expresión

$$\tilde{P}(x, s) = \frac{1}{2v[(s + vc)e^{c\frac{L}{2}} - (vc - s)e^{-c\frac{L}{2}}]} [(vc + s + \alpha)e^{c(\frac{L}{2} - |x|)} - (vc - s - \alpha)e^{-c(\frac{L}{2} - |x|)}]. \quad (2.88)$$

Finalmente, a partir de (2.88) obtenemos la fracción de partículas atrapadas en una frontera en el dominio de Laplace dada por

$$\tilde{W}(s) = \frac{1}{(s + vc)e^{c\frac{L}{2}} - (vc - s)e^{-c\frac{L}{2}}} = \frac{1}{2} \frac{1}{s \cosh(cb) + vc \sinh(cb)}, \quad (2.89)$$

teniendo que la distribución de probabilidad total en el espacio de Laplace dentro del intervalo $[a, b]$, está dada por

$$\tilde{P}(x, s) = \frac{\tilde{W}(s)}{2v} \left[(vc + s + \alpha)e^{cL(\frac{1}{2} - \frac{|x|}{L})} - (vc - s - \alpha)e^{-cL(\frac{1}{2} - \frac{|x|}{L})} \right]. \quad (2.90)$$

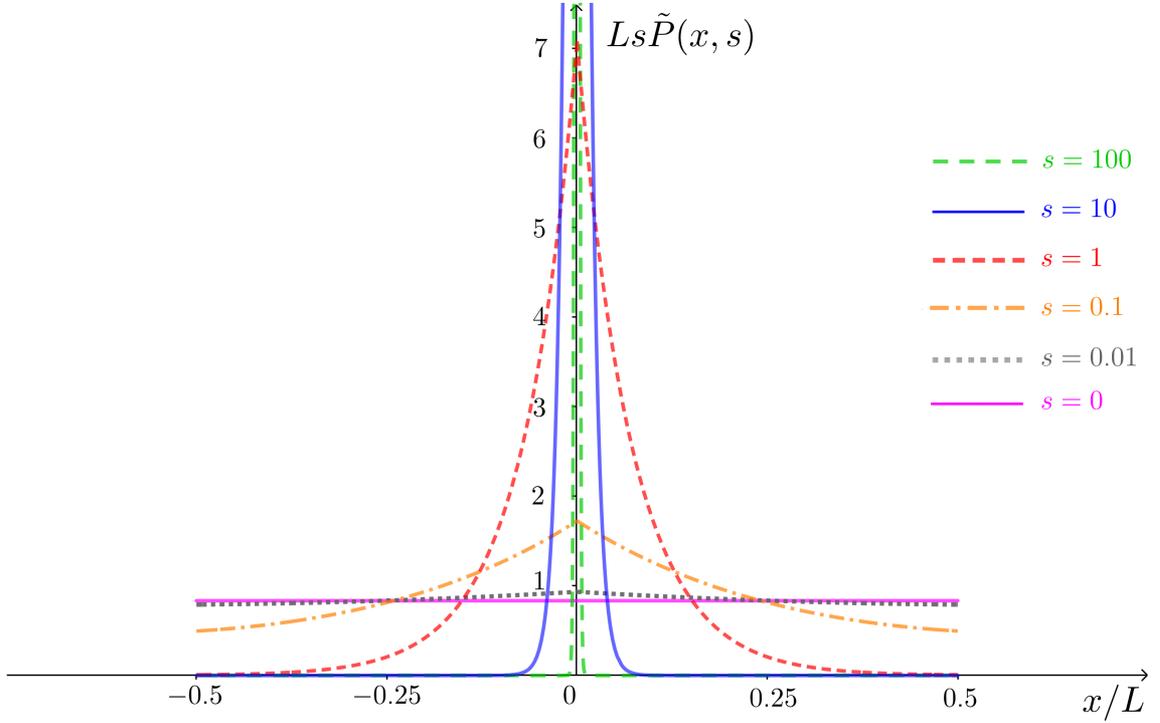


Figura 2.4: Evolución de la distribución de probabilidad en el dominio de Laplace $\tilde{P}(x, s)$ adimensionalizada, a diferentes valores de s .

Debido a que resulta bastante complicado obtener una expresión de la distribución de probabilidad P aplicando transformada inversa de Laplace, procedemos a encontrar una expresión de dicha distribución en el régimen estacionario a partir del método presentado en (A.2) del Apéndice, llegando al siguiente resultado

$$P(x) = \frac{\alpha}{2v} \left(\frac{1}{1 + \frac{\alpha L}{2v}} \right), \quad (2.91)$$

donde si definimos $l = v/\alpha$, como l la longitud de persistencia y la sustituimos en (2.93), nos resulta que

$$P(x) = \frac{1}{2l \left(1 + \frac{L}{2l} \right)}. \quad (2.92)$$

Esta última expresión resulta ser la misma dentro del intervalo definido por la caja unidimensional,

obtenida en [25]. Ahora analizamos la evolución de la distribución de probabilidad en el espacio de Laplace ($\tilde{P}(x, s)$) con respecto a s , a partir de la expresión (2.90) y del límite dado (A.25). Para ello procedemos a adimensionalizar la distribución de probabilidad multiplicándola por s como lo establece (A.25) y por L que es la longitud de la caja, notando también que podemos adimensionalizar v a partir de considerar el producto αL como una velocidad característica del sistema; y por último adimensionalizamos x con L . Con el fin de ver claramente la aproximación al límite dado en (2.92) al disminuir el valor de s , consideramos sin pérdida de generalidad $L\alpha/v = 10$. En la figura 2.4 se puede observar la evolución de \tilde{P} en todo el espacio de la caja unidimensional y en el dominio de Laplace, donde a un tiempo muy pequeño (es decir, a un valor s sumamente grande), se comporta como una función delta y, en el régimen estacionario ($s = 0$) tiende a ser una constante tal y como se observa en el límite dado en (2.91). Este último resultado nos dice que en dicho régimen las partículas activas se distribuyen uniformemente en todo el espacio de la caja, indicándonos que la acumulación de partículas en las fronteras ocurre antes de llegar a este punto, lo cual no es observable al encontrarnos en el espacio de Laplace.

Lo que sucede físicamente es que inicialmente las partículas activas se encuentran en el centro y posteriormente, conforme avanza el tiempo, se distribuyen en todo el espacio y comienzan a acumularse en las paredes; después de cierto tiempo siguen acumulándose en las paredes por su movimiento persistente pero llega a haber un poco de acumulación en el centro por el tumble de los micronadadores; finalmente en el régimen estacionario las partículas se distribuyen uniformemente en todo el espacio describiendo una distribución de probabilidad en toda la caja, denotando que el sistema se encuentra en un estado de mínima energía. Esto es posible mencionarlo debido a lo obtenido en la figura 2.4 que es congruente con las simulaciones realizadas en [25] para el régimen temporal.

Debido a que nos es imposible realizar un análisis en el espacio real temporal de la distribución de probabilidad P , procedemos a hacer la siguiente analogía. Si abordamos un caso límite de las variables involucradas en este caso de confinamiento por paredes rígidas, esperaríamos que en algún punto las partículas se lleguen a comportar como partículas Brownianas confinadas por una caja. Dicho esto, si definimos la constante de difusión efectiva (\mathcal{D}) debida a la actividad de nuestro ensamble de partículas activas “run-and-tumble” como

$$\mathcal{D} \equiv \frac{v^2}{\alpha} = lv, \quad (2.93)$$

la cual al sustituirla junto con (2.76) en el resultado (2.90), nos resulta que

$$\tilde{P} = \frac{\left(\sqrt{\frac{s^2}{v^4} + \frac{s}{v^2\mathcal{D}}} + \frac{s}{v^2} + \frac{1}{\mathcal{D}} \right) e^{\sqrt{\frac{s^2}{v^2} + \frac{s}{\mathcal{D}}}\left(\frac{L}{2} - |x|\right)} - \left(\sqrt{\frac{s^2}{v^4} + \frac{s}{\mathcal{D}v^2}} - \frac{s}{v^2} - \frac{1}{\mathcal{D}} \right) e^{-\sqrt{\frac{s^2}{v^2} + \frac{s}{\mathcal{D}}}\left(\frac{L}{2} - |x|\right)}}{2 \left[\left(\frac{s}{v} + \sqrt{\frac{s^2}{v^2} + \frac{s}{\mathcal{D}}} \right) e^{\sqrt{\frac{s^2}{v^2} + \frac{s}{\mathcal{D}}}\left(\frac{L}{2}\right)} - \left(\sqrt{\frac{s^2}{v^2} + \frac{s}{\mathcal{D}}} - \frac{s}{v} \right) e^{-\sqrt{\frac{s^2}{v^2} + \frac{s}{\mathcal{D}}}\left(\frac{L}{2}\right)} \right]}, \quad (2.94)$$

donde si consideramos el límite en el que $v, \alpha \rightarrow \infty$, manteniendo \mathcal{D} constante, la distribución de probabilidad dada en (2.94) se comporta como la distribución de probabilidad \tilde{P} obtenida de aplicar transformada de Laplace a la expresión (2.28) para el caso de un ensemble de partículas Brownianas confinadas por una caja en una dimensión, dada por

$$\tilde{P}(x, s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{L} \left(\frac{1}{s + \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 D} \right) \cos\left(\frac{n\pi x_0}{L}\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right). \quad (2.95)$$

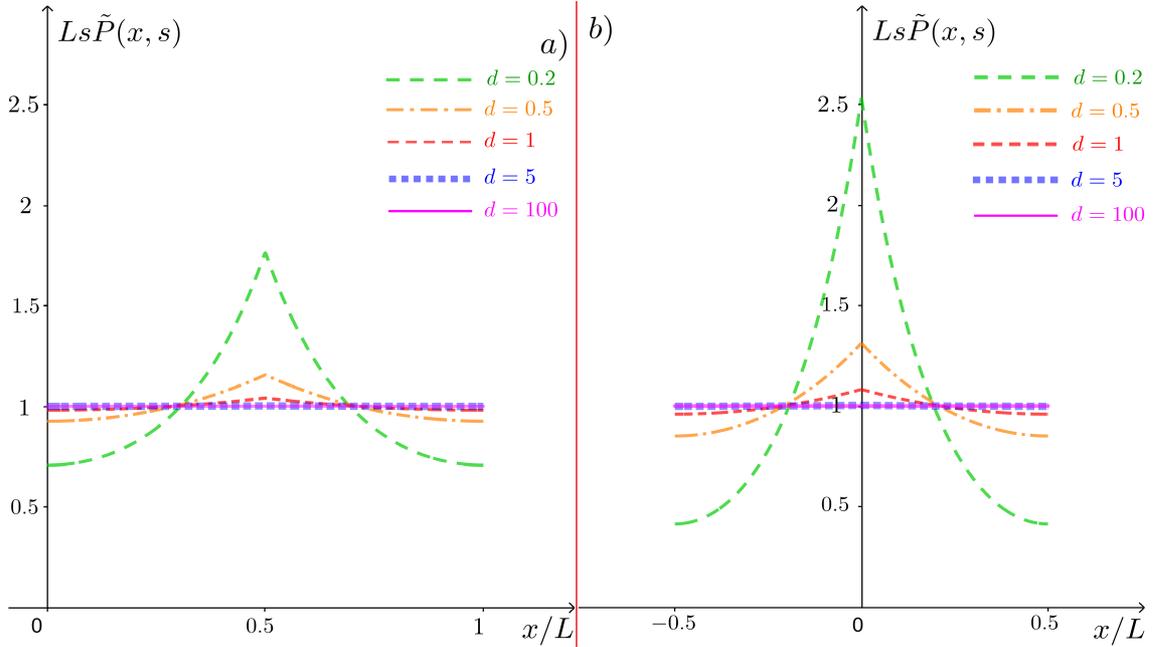


Figura 2.5: Comportamiento de la distribución de probabilidad adimensionalizada $\tilde{P}(x, s)$ a diferentes valores de d para a) un ensemble de partículas Brownianas y b) un ensemble de partículas activas "run-and-tumble", confinados por una caja unidimensional; considerando un valor S.P.G. para la variable de Laplace de $s = 1$.

Analizando gráficamente (2.94) y (2.95), procedemos a variar el siguiente parámetro adimensional en ambas expresiones

$$d = \sqrt{\frac{D}{s}} L, \quad (2.96)$$

y comentamos que se varía el mismo parámetro en ambas funciones por lo siguiente. Es importante resaltar que al considerar el límite $v, \alpha \rightarrow \infty$, en (2.94) podemos notar que para mantener \mathcal{D} constante, mientras v va creciendo, la longitud de persistencia tiende a 0, lo que indica que las partículas activas se van comportando como partículas Brownianas con una constante de difusión igual a la constante de difusión efectiva. Esto se puede ver claramente a partir de dividir entre α la ecuación (2.57)

$$\frac{1}{\alpha} \frac{\partial}{\partial t} J + \frac{v^2}{\alpha} \frac{\partial}{\partial x} P + J = 0, \quad (2.97)$$

de donde al aplicar el límite $v, \alpha \rightarrow \infty$, manteniendo v^2/α constante, tenemos que

$$\mathcal{D} \frac{\partial}{\partial x} P + J = 0. \quad (2.98)$$

Si derivamos con respecto a x esta última expresión, nos queda que

$$\mathcal{D} \frac{\partial^2}{\partial x^2} P + \frac{\partial}{\partial x} J = 0, \quad (2.99)$$

donde finalmente al sustituir la ecuación de continuidad (2.56), recuperamos la ecuación de difusión (2.1)

$$\frac{\partial}{\partial t} P = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P, \quad (2.100)$$

logrando demostrar que

$$D = \mathcal{D}. \quad (2.101)$$

En la figura 2.5 hacemos una comparación de ambas distribuciones de probabilidad (2.94) y (2.95) en el espacio de Laplace, variando el valor que involucra la constante difusiva. En dicha figura podemos observar que para valores relativamente grandes de dicho término, ambas distribuciones de probabilidad $\tilde{P}(x, s)$ se comportan uniformemente al mismo valor en todo el espacio unidimensional dentro de la caja, pero a valores pequeños de dicha constante, las distribuciones describen un aumento en el centro de la caja difiriendo entre sí en el valor de su amplitud; esto último se aborda en la siguiente analogía.

Físicamente lo que podemos observar en la gráfica 2.5 b) es que, al haber ya transcurrido un tiempo considerable por el valor de la variable de Laplace $s = 1$ y al tratarse de un caso límite en el régimen difusivo, aún se tienen partículas acumuladas en las fronteras originando que la amplitud de la distribución de probabilidad sea mayor con respecto a la de la gráfica 2.5 a), teniendo en ambos casos que los micronadadores están mayormente concentrados en el centro, como se puede observar en la figura 2.1 para el caso de las partículas Brownianas. Ahora, al momento de aumentar la constante de difusión en ambas gráficas, tenemos que las partículas tienen mayor facilidad para desplazarse en el medio, originando que éstas puedan distribuirse uniformemente en el medio.

2.2.2. Confinamiento por un potencial armónico

Ahora abordaremos el caso de un ensamble de partículas activas “run-and-tumble” confinado por un potencial de atrapamiento, al cual se le asocia una fuerza que restringe el movimiento de las partículas confinándolas en una región del espacio unidimensional. Si definimos la velocidad de nado en cada dirección de las partículas en términos de dicha fuerza, tenemos que son de la forma

$$v_R(x) = v + \mu f(x), \quad (2.102)$$

$$v_L(x) = v - \mu f(x); \quad (2.103)$$

donde $v = cte$ es la velocidad de nado por defecto de las partículas en ausencia del potencial, μ la movilidad de las partículas en el medio y $f(x)$ la fuerza asociada. Entonces, si sustituimos (2.102) y (2.103) en las ecuaciones (1.47) y (1.48), considerando (2.53) para la tasa de cambio de dirección, éstas ahora son de la forma

$$\frac{\partial}{\partial t} P_R(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} ([v + \mu f(x)] P_R(x, t)) = \frac{\alpha}{2} [P_L(x, t) - P_R(x, t)], \quad (2.104)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} P_L(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} ([v - \mu f(x)] P_L(x, t)) = \frac{\alpha}{2} [P_R(x, t) - P_L(x, t)]. \quad (2.105)$$

Consideramos ahora que el potencial sea armónico, definiéndolo como

$$U(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2, \quad (2.106)$$

de tal manera que

$$f(x) = -m\omega^2 x = -U'(x), \quad (2.107)$$

de modo que (2.104) y (2.105) se ven como

$$\frac{\partial}{\partial t} P_R(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} ([v - \mu m \omega^2 x] P_R(x, t)) = \frac{\alpha}{2} [P_L(x, t) - P_R(x, t)], \quad (2.108)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} P_L(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} ([v + \mu m \omega^2 x] P_L(x, t)) = \frac{\alpha}{2} [P_R(x, t) - P_L(x, t)]. \quad (2.109)$$

Definimos

$$\gamma \equiv \mu m \omega^2, \quad (2.110)$$

así que

$$\frac{\partial}{\partial t} P_R(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} ([v - \gamma x] P_R(x, t)) = \frac{\alpha}{2} [P_L(x, t) - P_R(x, t)], \quad (2.111)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} P_L(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} ([v + \gamma x] P_L(x, t)) = \frac{\alpha}{2} [P_R(x, t) - P_L(x, t)]. \quad (2.112)$$

Ahora, como condición inicial decimos que

$$P_i(x, 0) = \frac{1}{2} \delta(x), \quad (2.113)$$

y como condición de frontera que

$$P_i(x \rightarrow \infty, t) = 0, \quad (2.114)$$

con $i = R, L$, donde la condición de frontera nos remite al hecho de que la probabilidad de encontrar a la partícula a una distancia considerablemente grande del origen, es cero, y que inicialmente el ensamble de partículas “run-and-tumble” se encuentra en el origen, teniendo que éstas pueden desplazarse hacia las dos posibles direcciones de movimiento dependiendo su velocidad de nado y tasa de cambio de dirección, las cuales no dependen de su posición a lo largo del tiempo.

Procediendo a resolver las ecuaciones (2.111) y (2.112), consideramos la transformada de Laplace dada por (2.69) y la aplicamos a cada uno de los términos de estas dos ecuaciones, donde podemos observar lo siguiente en el primer término del miembro izquierdo de ambas [12]

$$\int_0^\infty e^{-st} \frac{\partial}{\partial t} P_i dt = e^{-st} P_i \Big|_0^\infty - \int_0^\infty P_i \frac{\partial}{\partial t} e^{-st} dt = -\frac{1}{2} \delta(x) + s \tilde{P}_i, \quad (2.115)$$

denotando

$$\tilde{P}_i = \tilde{P}_i(x, s), \quad (2.116)$$

$$P_i = P_i(x, t); \quad (2.117)$$

teniendo que las ecuaciones (2.111) y (2.112) se ven como

$$-\frac{1}{2} \delta(x) + s \tilde{P}_R = \gamma x \frac{\partial}{\partial x} \tilde{P}_R + \gamma \tilde{P}_R - v \frac{\partial}{\partial x} \tilde{P}_R - \alpha \tilde{P}_R + \alpha \tilde{P}_L, \quad (2.118)$$

$$-\frac{1}{2} \delta(x) + s \tilde{P}_L = \gamma x \frac{\partial}{\partial x} \tilde{P}_L + \gamma \tilde{P}_L + v \frac{\partial}{\partial x} \tilde{P}_L - \alpha \tilde{P}_L + \alpha \tilde{P}_R; \quad (2.119)$$

ordenando éstas últimas, tenemos que

$$(\gamma x - v) \frac{\partial}{\partial x} \tilde{P}_R + (\gamma - s - \alpha) \tilde{P}_R + \alpha \tilde{P}_L = -\frac{1}{2} \delta(x), \quad (2.120)$$

$$(\gamma x + v) \frac{\partial}{\partial x} \tilde{P}_L + (\gamma - s - \alpha) \tilde{P}_L + \alpha \tilde{P}_R = -\frac{1}{2} \delta(x). \quad (2.121)$$

Para conocer la longitud del intervalo de confinamiento, basta con observar las restricciones impuestas en (2.102) y (2.103) para la velocidad de nado. Es claro que para que las partículas no vayan más allá de la frontera de dicho intervalo, es necesario que en esos puntos su velocidad de nado tenga que ser cero, es decir que su velocidad por defecto v sea igual al término restrictivo $\mu f(x)$, teniendo que

$$v = \pm \mu f(x), \quad (2.122)$$

de donde

$$v = \mp \mu m \omega^2 x, \quad (2.123)$$

así que

$$x = \pm \frac{v}{\gamma}, \quad (2.124)$$

por tanto, la posición de la partícula activa (x) cumple con que $x \in [-v/\gamma, v/\gamma]$. Ahora, si hacemos un cambio de variable

$$x = \frac{v}{\gamma}(1 - 2z), \quad (2.125)$$

implica entonces

$$x \in \left[\frac{-v}{\gamma}, \frac{v}{\gamma} \right] \Rightarrow z \in [0, 1], \quad (2.126)$$

y que

$$\tilde{P}_i(x, s) = \tilde{P}_i \left(\frac{v}{\gamma}[1 - 2z], s \right), \quad (2.127)$$

por lo que aplicando dicho cambio de variable a las ecuaciones (2.120) y (2.121), observamos que para el primer término del miembro izquierdo de la ecuación (2.120) sucede lo siguiente

$$\begin{aligned} (\gamma x - v) \frac{\partial}{\partial x} \tilde{P}_R &= \left[\gamma \left(\frac{v}{\gamma}[1 - 2z] \right) - v \right] \frac{\partial z}{\partial x} \frac{\partial}{\partial z} \tilde{P}_R = -2vz \frac{\partial z}{\partial x} \frac{\partial}{\partial z} \tilde{P}_R = \\ &= -2vz \left(\frac{-\gamma}{2v} \right) \frac{\partial}{\partial z} \tilde{P}_R = \gamma z \frac{\partial}{\partial z} \tilde{P}_R; \end{aligned} \quad (2.128)$$

para el de la ecuación (2.121) sucede algo semejante

$$\begin{aligned} (\gamma x + v) \frac{\partial}{\partial x} \tilde{P}_L &= \left[\gamma \left(\frac{v}{\gamma}[1 - 2z] \right) + v \right] \frac{\partial z}{\partial x} \frac{\partial}{\partial z} \tilde{P}_L = [2v - 2vz] \left(\frac{-\gamma}{2v} \right) \frac{\partial}{\partial z} \tilde{P}_L \\ &= (z - 1) \gamma \frac{\partial}{\partial z} \tilde{P}_L. \end{aligned} \quad (2.129)$$

Y para el miembro derecho de ambas ecuaciones consideramos una propiedad de la delta de Dirac

$$\delta(ax) = \frac{1}{a} \delta(x), \forall a \neq 0, \quad (2.130)$$

de tal manera que

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} \delta(x) &= -\frac{1}{2} \delta \left(\frac{v}{\gamma}[1 - 2z] \right) = -\frac{1}{2} \delta \left(\frac{-2v}{\gamma} \left[z - \frac{1}{2} \right] \right) = \\ &= -\frac{1}{2 \left[\frac{2v}{\gamma} \right]} \delta \left(z - \frac{1}{2} \right) = \frac{-\gamma}{4v} \delta \left(z - \frac{1}{2} \right), \end{aligned} \quad (2.131)$$

por lo que (2.120) y (2.121) toman la forma

$$\gamma z \frac{\partial}{\partial z} \tilde{P}_R + (\gamma - s - \alpha) \tilde{P}_R + \alpha \tilde{P}_L = -\frac{\gamma}{4v} \delta \left(z - \frac{1}{2} \right), \quad (2.132)$$

$$\gamma [z - 1] \frac{\partial}{\partial z} \tilde{P}_L + (\gamma - s - \alpha) \tilde{P}_L + \alpha \tilde{P}_R = -\frac{\gamma}{4v} \delta \left(z - \frac{1}{2} \right). \quad (2.133)$$

Finalmente, dividiendo entre γ estas dos últimas ecuaciones, tenemos que

$$z \frac{\partial}{\partial z} \tilde{P}_R + (1 - \bar{s} - \bar{\alpha}) \tilde{P}_R + \bar{\alpha} \tilde{P}_L = -\frac{1}{4v} \delta \left(z - \frac{1}{2} \right), \quad (2.134)$$

$$(z - 1) \frac{\partial}{\partial z} \tilde{P}_L + (1 - \bar{s} - \bar{\alpha}) \tilde{P}_L + \bar{\alpha} \tilde{P}_R = -\frac{1}{4v} \delta \left(z - \frac{1}{2} \right), \quad (2.135)$$

definiendo así

$$\bar{s} = \frac{s}{\gamma}, \quad (2.136)$$

$$\bar{\alpha} = \frac{\alpha}{\gamma}. \quad (2.137)$$

Las ecuaciones ahora por resolver son (2.134) y (2.135) y para ello consideramos la condición de normalización original la cual establece que la probabilidad de encontrar a la partícula dentro del intervalo de confinamiento $\left[\frac{-v}{\gamma}, \frac{v}{\gamma} \right]$ es 1, es decir

$$\int_{-\frac{v}{\gamma}}^{\frac{v}{\gamma}} [P_R(x, t) + P_L(x, t)] dx = 1; \quad (2.138)$$

hacemos

$$\int_{\frac{v}{\gamma}}^{-\frac{v}{\gamma}} [P_R(x, t) + P_L(x, t)] dx = -1, \quad (2.139)$$

retomando el cambio de variable dado en (2.27), se tiene que

$$\frac{dx}{dz} = -\frac{-2v}{\gamma}, \quad (2.140)$$

de tal manera que aplicando este cambio a la condición de normalización

$$\left(\frac{-2v}{\gamma} \right) \int_0^1 [P_R(z, t) + P_L(z, t)] dz = -1, \quad (2.141)$$

donde

$$\int_0^1 [P_R(z, t) + P_L(z, t)] dz = \frac{\gamma}{2v}. \quad (2.142)$$

Si aplicamos la transformada de Laplace a esta última expresión, observamos que para el miembro derecho de la igualdad se tiene que

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{-st} \frac{\gamma}{2v} dt &= \frac{\gamma}{2v} \int_0^\infty e^{-st} dt = -\frac{\gamma}{2vs} \int_0^\infty e^{-st} (-s) dt \\ &= -\frac{\gamma}{2vs} e^{-st} \Big|_0^\infty = -\frac{\gamma}{2vs} [0 - 1] = \frac{\gamma}{2vs}, \end{aligned} \quad (2.143)$$

por lo que (2.142) toma la forma

$$\int_0^1 [\tilde{P}_R(z, s) + \tilde{P}_L(z, s)] dz = \frac{\gamma}{2vs} = \frac{1}{2v\bar{s}}. \quad (2.144)$$

Resolvemos las ecuaciones de manera separada para $z < \frac{1}{2}$ y $z > \frac{1}{2}$ por la divergencia en $z = \frac{1}{2}$ debida a la función δ . Cabe mencionar que las soluciones en estas dos regiones disjuntas están relacionadas mediante la condición de coincidencia en $z = \frac{1}{2}$ de la siguiente manera [12]

$$\tilde{P}_R(z = \frac{1}{2} + \epsilon, s) - \tilde{P}_R(z = \frac{1}{2} - \epsilon, s) = -\frac{1}{2}, \quad (2.145)$$

$$\tilde{P}_L(z = \frac{1}{2} + \epsilon, s) - \tilde{P}_L(z = \frac{1}{2} - \epsilon, s) = \frac{1}{2}, \quad (2.146)$$

donde $\epsilon \rightarrow 0^+$. Como ya mencionamos, esta discontinuidad en $z = \frac{1}{2}$ en la transformada de Laplace $\tilde{P}_i(z, s)$, es originada de la función δ en $x = 0$ por las condición inicial; sin embargo, dichas discontinuidades no implican que en tiempo real las distribuciones $P_i(x, t)$ sean discontinuas en $x = 0$, de hecho para todo tiempo t , estas funciones son continuas en $x = 0$. De las ecuaciones (2.134) y (2.135) observamos que su solución cumple con la siguiente propiedad de simetría

$$\tilde{P}_R(z, s) = \tilde{P}_L(1 - z, s), \quad (2.147)$$

$$\tilde{P}_L(z, s) = \tilde{P}_R(1 - z, s). \quad (2.148)$$

Por ello, es suficiente resolver ambas ecuaciones en una de las dos regiones que componen al intervalo de confinamiento, así que S.P.G. elegimos la región $(0 \leq z \leq \frac{1}{2})$. Así que, a partir de las condiciones dadas en (2.145) y (2.146) podemos emplear la propiedad de simetría obteniendo una nueva condición

$$\tilde{P}_L\left(z = \frac{1}{2} + \epsilon, s\right) - \tilde{P}_R\left(z = \frac{1}{2} - \epsilon, s\right) = -\frac{1}{2}, \quad (2.149)$$

entonces, concentrándonos en la región $(0 \leq z < 1/2)$, de las ecuaciones diferenciales de primer orden en (2.134) y (2.135), los miembros derechos de ambas ecuaciones se anulan ya que

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty & si & z = \frac{1}{2} \\ 0 & si & z \neq \frac{1}{2} \end{cases}, \quad (2.150)$$

de modo que estas ecuaciones toman la forma

$$z \frac{\partial}{\partial z} \tilde{P}_R + (1 - \bar{s} - \bar{\alpha}) \tilde{P}_R + \bar{\alpha} \tilde{P}_L = 0, \quad (2.151)$$

$$(z - 1) \frac{\partial}{\partial z} \tilde{P}_L + (1 - \bar{s} - \bar{\alpha}) \tilde{P}_L + \bar{\alpha} \tilde{P}_R = 0. \quad (2.152)$$

Ahora, si despejamos el término $\bar{\alpha} \tilde{P}_L$ de la ecuación (2.151)

$$\bar{\alpha} \tilde{P}_L = -z \frac{\partial}{\partial z} \tilde{P}_R + (\bar{\alpha} + \bar{s} - 1) \tilde{P}_R, \quad (2.153)$$

y la sustituimos en (2.152)

$$\begin{aligned} & (z - 1) \frac{\partial}{\partial z} \left[-z \frac{\partial}{\partial z} \tilde{P}_R + (\bar{\alpha} + \bar{s} - 1) \tilde{P}_R \right] + \\ & (1 - \bar{s} - \bar{\alpha}) \left[-z \frac{\partial}{\partial z} \tilde{P}_R + (\bar{\alpha} + \bar{s} - 1) \tilde{P}_R \right] = -\bar{\alpha}^2 \tilde{P}_R, \end{aligned} \quad (2.154)$$

obteniendo una ecuación de la forma

$$\begin{aligned} & z[1 - z] \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tilde{P}_R + (2 - \bar{\alpha} - \bar{s} - 3z + 2\bar{s}z + 2\bar{\alpha}z) \frac{\partial}{\partial z} \tilde{P}_R \\ & - (1 - 2\bar{\alpha} - 2\bar{s} + 2\bar{\alpha}\bar{s} + \bar{s}^2) \tilde{P}_R = 0. \end{aligned} \quad (2.155)$$

De manera análoga si despejamos el término $\bar{\alpha} \tilde{P}_R$ de (2.152) y se sustituye en (2.151), obtenemos una ecuación similar a (2.155) dada por

$$\begin{aligned} & z[1 - z] \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tilde{P}_L + (1 - \bar{\alpha} - \bar{s} - 3z + 2\bar{s}z + 2\bar{\alpha}z) \frac{\partial}{\partial z} \tilde{P}_L \\ & - (1 - 2\bar{\alpha} - 2\bar{s} + 2\bar{\alpha}\bar{s} + \bar{s}^2) \tilde{P}_L = 0. \end{aligned} \quad (2.156)$$

Por tanto, las ecuaciones (2.155) y (2.156) se *vuelven* ecuaciones hipergeométricas estándar como se muestra a continuación

$$z[1 - z] \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tilde{P}_R + [c_R - (1 + a + b)z] \frac{\partial}{\partial z} \tilde{P}_R - ab \tilde{P}_R = 0, \quad (2.157)$$

$$z[1 - z] \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tilde{P}_L + [c_L - (1 + a + b)z] \frac{\partial}{\partial z} \tilde{P}_L - ab \tilde{P}_L = 0, \quad (2.158)$$

si denotamos

$$\begin{aligned} a &= 1 - \bar{s}, \\ b &= 1 - 2\bar{\alpha} - \bar{s}, \\ c_R &= 2 - \bar{\alpha} - \bar{s}, \\ c_L &= 1 - \bar{\alpha} - \bar{s}. \end{aligned} \quad (2.159)$$

Sabemos que empleando el método de Frobenius se obtienen dos soluciones linealmente independientes para la ecuación hipergeométrica, dadas por

$$\begin{aligned} y_1 &= F(a, b, c_{R,L}; z), \\ y_2 &= x^{1-c_{R,L}} F(a+1-c_{R,L}, b+1-c_{R,L}, 2-c_{R,L}; z), \end{aligned} \quad (2.160)$$

de modo que la solución general es una combinación lineal de ambas. Considerando esto último para la solución de $\tilde{P}_R(z, s)$ y $\tilde{P}_L(z, s)$ de ambas ecuaciones hipergeométricas (2.157) y (2.158), recordando lo denotado en (2.159), se obtiene que

$$\tilde{P}_R(z, s) = AF(1-\bar{s}, 1-2\bar{\alpha}-\bar{s}, 2-\bar{\gamma}-\bar{s}, z) + Bz^{\bar{\alpha}+\bar{s}-1}F(\bar{\alpha}, -\bar{\alpha}, \bar{\alpha}+\bar{s}, z), \quad (2.161)$$

$$\tilde{P}_L(z, s) = CF(1-\bar{s}, 1-2\bar{\alpha}-\bar{s}, 1-\bar{\alpha}-\bar{s}, z) + Dz^{\bar{\alpha}+\bar{s}}F(1+\bar{\alpha}, 1-\bar{\alpha}, 1+\bar{\alpha}+\bar{s}, z), \quad (2.162)$$

donde $F(a, b, c, z) = {}_2F_1(a, b; c; z)$ es una función hipergeométrica estándar y A, B, C, D son constantes aún por determinar. Notamos que las constantes C y D están relacionadas con A y B . Esto es porque \tilde{P}_R y \tilde{P}_L satisfacen las ecuaciones diferenciales de primer orden acopladas. Si sustituimos estas soluciones generales en las dos ecuaciones de primer orden, para $z < 1/2$, se deduce que [12]

$$\begin{aligned} C &= -\frac{1-\bar{\alpha}-\bar{s}}{\bar{\alpha}}A, \\ D &= \frac{\alpha}{\bar{\alpha}+\bar{s}}B. \end{aligned} \quad (2.163)$$

En consecuencia, las soluciones (2.161) y (2.162) están dadas por

$$\begin{aligned} \tilde{P}_R(z, s) &= AF(1-\bar{s}, 1-2\bar{\alpha}-\bar{s}, 2-\bar{\gamma}-\bar{s}, z) + \\ & Bz^{\bar{\alpha}+\bar{s}-1}F(\bar{\alpha}, -\bar{\alpha}, \bar{\alpha}+\bar{s}, z), \end{aligned} \quad (2.164)$$

$$\begin{aligned} \tilde{P}_L(z, s) &= A\frac{\bar{\alpha}+\bar{s}-1}{\bar{\alpha}}F(1-\bar{s}, 1-2\bar{\alpha}-\bar{s}, 1-\bar{\alpha}-\bar{s}, z) + \\ & B\frac{\alpha}{\bar{\alpha}+\bar{s}}z^{\bar{\alpha}+\bar{s}}F(1+\bar{\alpha}, 1-\bar{\alpha}, 1+\bar{\alpha}+\bar{s}, z), \end{aligned} \quad (2.165)$$

donde ahora solo nos quedan dos constantes A y B por determinar. Para ello empleamos la condición de normalización dada en (2.144)(i) y la condición de discontinuidad dada en (2.149)(ii). Observamos que si empleamos la simetría discutida anteriormente, en $z = 1/2$, la condición de normalización se reduce a

$$\int_0^{\frac{1}{2}} [\tilde{P}_R(z, s) + \tilde{P}_L(z, s)] dz = \frac{1}{4v\bar{s}}. \quad (2.166)$$

Entonces, encontrando A y B a partir de (i) y (ii), tenemos que [12]

$$A = 0, \quad (2.167)$$

$$B = \frac{2^{\bar{\alpha}+\bar{s}-2}}{-F(1-\bar{\alpha}, \bar{\alpha}; \bar{\alpha}+\bar{s}; \frac{1}{2}) + 2F(-\bar{\alpha}, \bar{\alpha}; \bar{\alpha}+\bar{s}; \frac{1}{2})}. \quad (2.168)$$

El denominador en la expresión para B puede ser simplificada usando las identidades de la función hipergeométrica dada por [12]

$$\begin{aligned} -F\left(1 - \bar{\alpha}, \bar{\alpha}, \bar{s} + \bar{\alpha}, \frac{1}{2}\right) + 2F\left(-\bar{\alpha}, \bar{\alpha}, \bar{\alpha} + \bar{s}, \frac{1}{2}\right) \\ = \frac{\sqrt{\pi} 2^{1-\bar{\alpha}-\bar{s}} \Gamma[\bar{\alpha} + \bar{s}]}{\Gamma\left[\frac{\bar{s}}{2}\right] \Gamma\left[\frac{1+2\bar{\alpha}+\bar{s}}{2}\right]}. \end{aligned} \quad (2.169)$$

Por lo tanto, sustituyendo las expresiones para A y B en las ecuaciones (2.164) y (2.165), tenemos que la solución general está dada por [12]

$$\tilde{P}(z, s) = B(s) z^{\bar{\alpha}+\bar{s}-1} F(1 - \bar{\alpha}, \bar{\alpha}, \bar{\alpha} + \bar{s}, z), \quad (2.170)$$

considerando el hecho de que

$$\tilde{P}(z, s) = \tilde{P}_R(z, s) + \tilde{P}_L(z, s), \quad (2.171)$$

donde debido a (2.168) y (2.169), la amplitud $B(s)$ está dada por

$$B(s) = 2^{2(\bar{\alpha}+\bar{s})-3} \frac{\Gamma(\bar{s}/2) \Gamma[\bar{\alpha} + (1 + \bar{s})/2]}{\sqrt{\pi} \Gamma(\bar{\alpha} + \bar{s})}. \quad (2.172)$$

Definiendo $\tilde{P}(z, s)$ de manera explícita a partir de (2.170) y (2.172), tenemos que

$$\tilde{P}(z, s) = 2^{2(\bar{\alpha}+\bar{s})-3} \frac{\Gamma(\bar{s}/2) \Gamma[\bar{\alpha} + (1 + \bar{s})/2]}{\sqrt{\pi} \Gamma(\bar{\alpha} + \bar{s})} \cdot [z^{\bar{\alpha}+\bar{s}-1} F(1 - \bar{\alpha}, \bar{\alpha}, \bar{\alpha} + \bar{s}, z)]. \quad (2.173)$$

En la figura 2.6 podemos ver el comportamiento de la expresión para $\tilde{P}(z, s)$ dada en (2.174) donde se considera en la primera gráfica valores para $\bar{\alpha}$ y \bar{s} de 0,25 y 1, respectivamente; y en la segunda gráfica de 0,5 y 10, respectivamente.

Ahora, si consideramos el límite $s \rightarrow 0$ en la expresión (2.173), obtenemos que [12]

$$\tilde{P}(z, s) \rightarrow \frac{1}{s} \frac{\gamma}{2} \frac{[z(1-z)]^{\bar{\alpha}-1}}{B(\bar{\alpha}, \bar{\alpha})}, \quad (2.174)$$

con $B(\bar{\alpha}, \bar{\alpha})$ siendo la función beta, definiéndola de la siguiente manera a partir de sus propiedades

$$B(\bar{\alpha}, \bar{\alpha}) = \frac{\Gamma(\bar{\alpha}) \Gamma(\bar{\alpha})}{\Gamma(2\bar{\alpha})}; \quad (2.175)$$

Si expresamos z en términos de x a partir de (2.125) y aplicando transformada de Laplace inversa a (2.174), obtenemos la expresión para la distribución de probabilidad estacionaria

$$P(x) = \frac{2}{4^{\bar{\alpha}} B(\bar{\alpha}, \bar{\alpha})} \frac{\gamma}{v} \left[1 - \left(\frac{\gamma x}{v} \right)^2 \right]^{\bar{\alpha}-1}. \quad (2.176)$$

En la figura 2.6 se puede observar el comportamiento de esta distribución de probabilidad estacionaria adimensionalizada, a diferentes valores de $\bar{\alpha}$, donde el intervalo de confinamiento es $\left[-\frac{v}{\gamma}, \frac{v}{\gamma}\right]$, pero por dicha adimensionalización, el intervalo es $[-1, 1]$. En dicha figura podemos observar que para $\alpha > 1$ la longitud de persistencia de las partículas es menor que el intervalo de confinamiento, lo que implica que al ser su actividad menor que la fuerza de atrapamiento del potencial de confinamiento, la distribución de probabilidad $P(x)$ llega a tener un comportamiento gaussiano, cuyo máximo se da en el origen por la expresión dada del potencial armónico, denotando que el ensamble se concentra en mayor medida en ese punto.

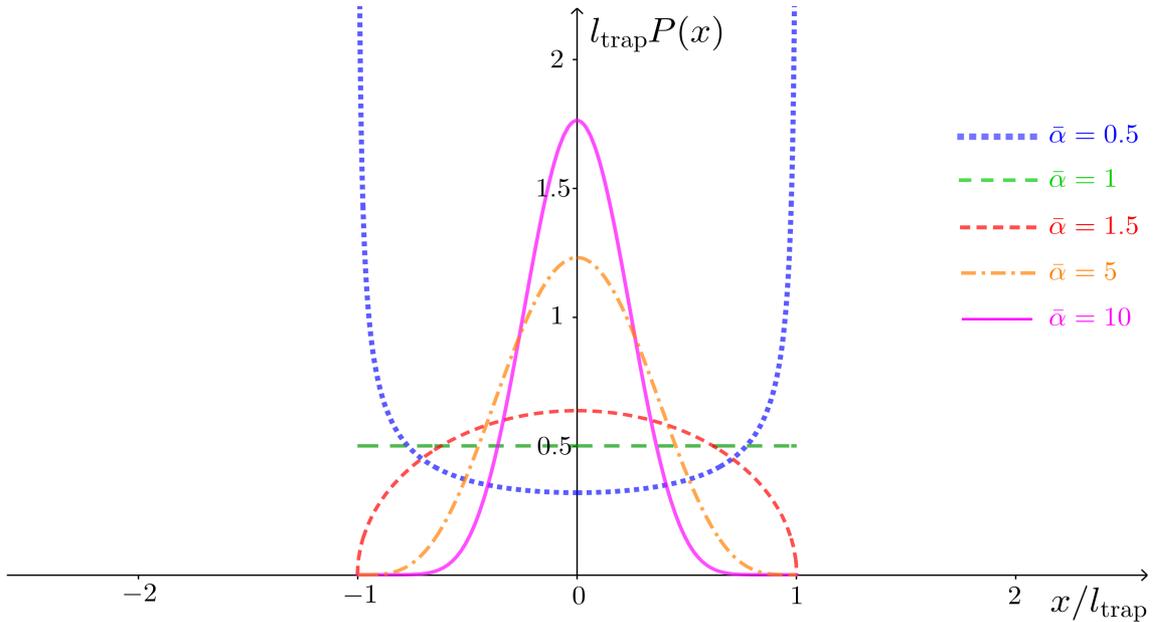


Figura 2.6: Comportamiento de la distribución de probabilidad estacionaria $P(x)$ adimensionalizada, a diferentes valores de $\bar{\alpha}$.

Por otro lado, cuando $\alpha < 1$, la longitud de persistencia es mayor que el intervalo de confinamiento, dando origen a que al ser la actividad mayor que la fuerza de atrapamiento del potencial armónico, las partículas se acumulan en los puntos de retorno, de modo que al observar el comportamiento de la distribución de probabilidad estacionaria $P(x)$, ésta tiende a crecer en las fronteras del intervalo dejando ver que el potencial no es lo suficientemente *fuerte* para confinar al ensamble de partículas y éstas se acumulan en dichos puntos intentando escapar.

En el caso transitorio en el que $\alpha = 1$, sucede que el intervalo de confinamiento es igual que la longitud de persistencia, de tal manera que al compensarse la actividad de las partículas con la fuerza de atrapamiento del potencial por este hecho, la distribución de probabilidad estacionaria se comporta de manera uniforme en todo el espacio del intervalo; en este caso los efectos de la actividad contrarrestan la fuerza debida al potencial dando lugar a una fuerza neta igual a cero sobre las partículas y por ello se distribuyen uniforme en toda la región de confinamiento.

Finalmente, con el fin de analizar con mayor profundidad la expresión (2.176), cabe mencionar que si en esta última consideramos los límites $\alpha \rightarrow \infty$ y $v \rightarrow \infty$, manteniendo constante el término $v^2/\alpha = 2D$, la distribución de probabilidad estacionaria se comporta como la estacionaria correspondiente a un ensamble de partículas Brownianas confinadas por el mismo potencial armónico, la cual está dada por

$$P(x) = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi D}} \exp\left[-\frac{\gamma x^2}{2D}\right], \quad (2.177)$$

que corresponde a la distribución de probabilidad estacionaria dada en (2.50) (ver sección A.3 del Apéndice) si en ella tomamos el límite en el que $t \rightarrow \infty$. De hecho, es posible observar en la figura 2.6 que para valores de $\bar{\alpha} = 5, 10$ la distribución de probabilidad estacionaria tiende a adquirir un comportamiento similar a la de una gaussiana, tal y como lo describe la expresión (2.177), ya que la actividad disminuye al aumentar el término que involucra la tasa de cambio de dirección, logrando observar un comportamiento cada vez más Browniano.

Capítulo 3

Movimiento activo confinado sujeto a fluctuaciones térmicas

A lo largo de este capítulo presentamos el eslabón elemental que compete a nuestra investigación: el análisis de un ensamble de partículas “run-and-tumble” confinadas por un potencial armónico y sujetas a fluctuaciones térmicas debidas al medio. Es importante mencionar de entrada que los casos de confinamiento vistos en el capítulo anterior son de total relevancia en la deducción de una expresión de la distribución de probabilidad y en la interpretación de los resultados obtenidos. Debido a la complejidad del proceso, analíticamente se llega a la distribución de probabilidad estacionaria, en la cual se analizan diferentes regímenes interesantes. Uno de esos regímenes es el efectivo, el cual surge a partir de tomar el límite en el que la velocidad de nado (v) y su tasa de cambio de dirección (α) tienden a infinito, manteniendo $D_{\text{act}} = v^2/\alpha = cte$; como vimos anteriormente, en este régimen las partículas activas describen una distribución de probabilidad igual a la descrita por un ensamble de partículas Brownianas sujetas a las mismas condiciones.

Como meta secundaria y que va de la mano del análisis de este sistema, presentamos un mapeo del ensamble “run-and-tumble” a un ensamble de partículas Brownianas inmersas en un baño térmico inhomogéneo debido a las fluctuaciones y a la actividad; esto podemos realizarlo por lo que acabamos de mencionar, el sistema de partículas activas con las fluctuaciones térmicas jugando un papel importante en su distribución de probabilidad se podría ver como si se tuviera un baño térmico ficticio en el que una partícula pasiva se difunde produciendo la misma distribución estacionaria [39]. De esto puede obtenerse un perfil de temperatura efectivo que puede ser considerado como una medida de no equilibrio del sistema en cuestión.

3.1. Confinamiento por un potencial armónico

Sabemos que el objetivo de esta investigación es determinar la distribución de probabilidad de encontrar a una partícula activa “run-and-tumble” en cierto punto del espacio en una dimensión, confinado por un potencial armónico, a un determinado tiempo de observación de ser posible. Por ello, partimos de considerar las ecuaciones (1.47) y (1.48), que son las ecuaciones de difusión para partículas activas “run-and-tumble”, en las que realizaremos ciertos cambios en éstas a modo de que estén presentes las condiciones que queremos abordar en nuestro análisis. Primero, debido a que tenemos la presencia de un potencial armónico, las velocidades de nado v_L y v_R estarán dadas por

$$v_R = v - \mu U'(x), \quad (3.1)$$

$$v_L = v + \mu U'(x), \quad (3.2)$$

donde podemos observar que sin la presencia de dicho potencial dado por $U(x)$, se considera la velocidad de nado de la partícula en ambas direcciones como constante (v); de modo que al tener la presencia de $U(x)$, las velocidades de nado en ambas direcciones son de la forma dada en (3.1) y (3.2), donde aparece el término μ el cual es la movilidad de la partícula en el medio y que tiene unidades s/kg , ya que $[U'(x)] = kgm/s^2 = N$, teniendo que $[\mu U'(x)] = m/s$. También consideramos por simplicidad que

$$\alpha = \alpha_R(x) = \alpha_L(x) = cte; \quad (3.3)$$

por lo que dichas ecuaciones (1.47) y (1.48) toman la forma

$$\frac{\partial}{\partial t} P_R(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} [(v - \mu U'(x)) P_R(x, t)] = \frac{\alpha}{2} [P_L(x, t) - P_R(x, t)], \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} P_L(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} [(v + \mu U'(x)) P_L(x, t)] = \frac{\alpha}{2} [P_R(x, t) - P_L(x, t)]. \quad (3.5)$$

Por simplicidad, denotaremos $P_R = P_R(x, t)$, $P_L = P_L(x, t)$. Ya que este trabajo de investigación fue abordado con anterioridad, la razón del nuestro radica en la contemplación de un término debido a la difusión térmica por parte del medio en el que se encuentran las partículas activas. Dicho medio cumple con las mismas características consideradas en el caso del análisis de partículas pasivas Brownianas, donde el medio es viscoso y con un número de Reynolds pequeño, el cual implica que el fluido es laminar, de tal manera que las partículas de dicho medio permanecen estacionarias al momento de que éstas colisionan con las partículas activas. En nuestro caso tomamos en cuenta un medio con las mismas características y en las ecuaciones (3.4) y (3.5) se añade un término difusivo debido a las fluctuaciones térmicas

$$\frac{\partial}{\partial t} P_R + \frac{\partial}{\partial x} [(v - \mu U'(x)) P_R] = \frac{\alpha}{2} [P_L - P_R] + D_T \frac{\partial^2}{\partial x^2} P_R, \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} P_L - \frac{\partial}{\partial x} [(v + \mu U'(x)) P_L] = \frac{\alpha}{2} [P_R - P_L] + D_T \frac{\partial^2}{\partial x^2} P_L, \quad (3.7)$$

donde D_T es la constante de difusión térmica, la cual es la misma de las ecuaciones de difusión planteadas en el análisis de movimiento Browniano, de modo que observando las ecuaciones (3.6) y (3.7), vemos que existe un acoplamiento entre el movimiento activo confinado por el potencial y el comportamiento Browniano de dichas partículas activas con el medio en el que se encuentran. Debido a la complejidad de estas últimas ecuaciones, no podemos resolverlas para $P_R(x, t)$ y $P_L(x, t)$ siguiendo el mismo análisis presentado anteriormente donde no se consideraron los términos difusivos ni la presencia del potencial, por ello hacemos lo siguiente. Reordenando las ecuaciones (3.6) y (3.7) tenemos que

$$\frac{\partial}{\partial t} P_R + v \frac{\partial}{\partial x} P_R + \frac{\alpha}{2} [P_R - P_L] = \mu \frac{\partial}{\partial x} [U'(x) P_R] + D_T \frac{\partial^2}{\partial x^2} P_R, \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} P_L + v \frac{\partial}{\partial x} P_L + \frac{\alpha}{2} [P_L - P_R] = \mu \frac{\partial}{\partial x} [U'(x) P_L] + D_T \frac{\partial^2}{\partial x^2} P_L. \quad (3.9)$$

El potencial de confinamiento lo consideramos armónico y utilizamos la expresión para este la del oscilador armónico

$$U(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2, \quad (3.10)$$

donde

$$U'(x) = m \omega^2 x \quad (3.11)$$

y la razón de esto es porque dicha expresión permite seguir el análisis que se presentará más adelante. Así que utilizando (3.11) en ambas ecuaciones (3.8) y (3.9), éstas son de la forma

$$\frac{\partial}{\partial t} P_R + v \frac{\partial}{\partial x} P_R + \frac{\alpha}{2} [P_R - P_L] = \gamma \frac{\partial}{\partial x} (x P_R) + D_T \frac{\partial^2}{\partial x^2} P_R, \quad (3.12)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} P_L + v \frac{\partial}{\partial x} P_L + \frac{\alpha}{2} [P_L - P_R] = \gamma \frac{\partial}{\partial x} (x P_L) + D_T \frac{\partial^2}{\partial x^2} P_L, \quad (3.13)$$

donde

$$\gamma = \mu m \omega^2. \quad (3.14)$$

Ahora, consideramos la transformada de Fourier para P_i con $i = L, R$, dada en (1.15) y denotamos a $\hat{P}_R = \hat{P}_R(k, t)$ y $\hat{P}_L = \hat{P}_L(k, t)$, donde observamos que si aplicamos dicha transformación a cada uno de los términos de las ecuaciones (3.12) y (3.13), para el primer término del miembro izquierdo de ambas ecuaciones tenemos que

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \frac{\partial}{\partial t} P_i dx = \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} P_i dx = \frac{\partial}{\partial t} \hat{P}_i, \quad (3.15)$$

al segundo término del miembro izquierdo de ambas ecuaciones

$$\int_{-\infty}^{\infty} v e^{-ikx} \frac{\partial}{\partial x} P_i dx = v e^{-ikx} P_i \Big|_{-\infty}^{+\infty} + ikv \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} P_i dx = ikv \hat{P}_i, \quad (3.16)$$

CAPÍTULO 3. MOVIMIENTO ACTIVO CONFINADO SUJETO A FLUCTUACIONES TÉRMICAS

donde la evaluación es cero debido al comportamiento de las probabilidades P_i ($i = R, L$). Al tercer término del miembro izquierdo de ambas ecuaciones aplicándole transformada de Fourier

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \frac{\alpha}{2} [P_R - P_L] dx = \frac{\alpha}{2} [\hat{P}_R - \hat{P}_L], \quad (3.17)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \frac{\alpha}{2} [P_L - P_R] dx = \frac{\alpha}{2} [\hat{P}_L - \hat{P}_R]. \quad (3.18)$$

Si aplicamos transformada de Fourier al segundo término del miembro derecho de ambas ecuaciones, tenemos que

$$D_T \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \frac{\partial^2}{\partial x^2} P_i dx = D_T e^{-ikx} \frac{\partial}{\partial x} P_i \Big|_{-\infty}^{+\infty} + ik D_T \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \frac{\partial}{\partial x} P_i dx = -D_T k^2 \hat{P}_i, \quad (3.19)$$

donde se consideran las ecuaciones dadas en (3.17) y (3.18) para la integral en ambos términos de estas últimas ecuaciones (3.19) y se observa que las evaluaciones de los primeros términos son cero por el comportamiento de la derivada parcial de P_i ($i = R, L$).

Y finalmente para el primer término del miembro derecho de ambas ecuaciones aplicamos dicha transformada

$$\gamma \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \frac{\partial}{\partial x} (x P_i) dx = \gamma e^{-ikx} x P_i \Big|_{-\infty}^{+\infty} + \gamma ik \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} x P_i dx, \quad (3.20)$$

donde la evaluación en las dos últimas ecuaciones en (3.20) es cero debido al argumento expuesto anteriormente y el segundo término de ambas ecuaciones lo denotamos por

$$F[x P_i] = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} x P_i dx, \quad (3.21)$$

la cual es la transformada de Fourier de la función $x P_i$ ($i = L, R$).

Observemos lo siguiente

$$\frac{\partial}{\partial k} \hat{P}_i = \frac{\partial}{\partial k} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} P_i dx = \int_{-\infty}^{\infty} P_i \frac{\partial}{\partial k} e^{-ikx} dx = -i \int_{-\infty}^{\infty} dx P_i x e^{-ikx} = -i F[x P_i], \quad (3.22)$$

lo que implica que

$$F[x P_i] = i \frac{\partial}{\partial k} \hat{P}_i, \quad (3.23)$$

así que

$$\gamma \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} \frac{\partial}{\partial x} (x P_i) = \gamma ik \left(i \frac{\partial}{\partial k} \hat{P}_i \right) = -\gamma k \frac{\partial}{\partial k} \hat{P}_i, \quad (3.24)$$

por lo que las ecuaciones (3.12) y (3.13) en el espacio de Fourier están dadas por

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{P}_R + ikv\hat{P}_R + \frac{\alpha}{2}[\hat{P}_R - \hat{P}_L] = -\gamma k \frac{\partial}{\partial k}\hat{P}_R - D_T k^2 \hat{P}_R, \quad (3.25)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{P}_L - ikv\hat{P}_L + \frac{\alpha}{2}[\hat{P}_L - \hat{P}_R] = -\gamma k \frac{\partial}{\partial k}\hat{P}_L - D_T k^2 \hat{P}_L. \quad (3.26)$$

Proponemos las soluciones para \hat{P}_i con $i = R, L$, en el caso en el que $\gamma = 0$

$$\hat{P}_i = e^{-D_T k^2 t} \hat{P}_{iact}, \quad (3.27)$$

y en el caso en el que $\gamma \neq 0$, proponemos

$$\hat{P}_i = e^{-\frac{D_T k^2}{2\gamma}(1-e^{-2\gamma t})} \hat{P}_{iact}, \quad (3.28)$$

de tal manera que si determinamos la derivada temporal de la solución para el caso $\gamma \neq 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\hat{P}_i &= e^{-\frac{D_T k^2}{2\gamma}(1-e^{-2\gamma t})} \left[\frac{D_T k^2}{2\gamma} e^{-2\gamma t} \right] (-2\gamma) \hat{P}_{iact} + e^{-\frac{D_T k^2}{2\gamma}(1-e^{-2\gamma t})} \frac{\partial}{\partial t} \hat{P}_{iact} \\ &= e^{-\frac{D_T k^2}{2\gamma}(1-e^{-2\gamma t})} [-D_T k^2 e^{-2\gamma t}] \hat{P}_{iact} + e^{-\frac{D_T k^2}{2\gamma}(1-e^{-2\gamma t})} \frac{\partial}{\partial t} \hat{P}_{iact}, \end{aligned} \quad (3.29)$$

y su derivada espacial con respecto a la variable de Fourier

$$\frac{\partial}{\partial k}\hat{P}_i = e^{-\frac{D_T k^2}{2\gamma}(1-e^{-2\gamma t})} \left[\frac{-D_T k}{\gamma}(1-e^{-2\gamma t}) \right] \hat{P}_{iact} + e^{-\frac{D_T k^2}{2\gamma}(1-e^{-2\gamma t})} \frac{\partial}{\partial k} \hat{P}_{iact}, \quad (3.30)$$

y sustituyendo (3.28), (3.29) y (3.30) en la ecuación (3.25), tenemos que

$$\begin{aligned} &e^{-\frac{D_T k^2}{2\gamma}(1-e^{-2\gamma t})} [-D_T k^2 e^{-2\gamma t}] \hat{P}_{Ract} + e^{-\frac{D_T k^2}{2\gamma}(1-e^{-2\gamma t})} \frac{\partial}{\partial t} \hat{P}_{Ract} \\ &+ ikv e^{-\frac{D_T k^2}{2\gamma}(1-e^{-2\gamma t})} \hat{P}_{Ract} + \frac{\alpha}{2} (e^{-\frac{D_T k^2}{2\gamma}(1-e^{-2\gamma t})}) (\hat{P}_{Ract} - \hat{P}_{Lact}) = \\ &-\gamma k (e^{-\frac{D_T k^2}{2\gamma}(1-e^{-2\gamma t})}) \left[\frac{-D_T k}{\gamma}(1-e^{-2\gamma t}) \right] \hat{P}_{Ract} + e^{-\frac{D_T k^2}{2\gamma}(1-e^{-2\gamma t})} \frac{\partial}{\partial k} \hat{P}_{Ract} - \\ &D_T k^2 e^{-\frac{D_T k^2}{2\gamma}(1-e^{-2\gamma t})} \hat{P}_{Ract}, \end{aligned} \quad (3.31)$$

donde simplificando términos tenemos

$$\begin{aligned} &-D_T k^2 e^{-2\gamma t} \hat{P}_{Ract} + \frac{\partial}{\partial t} \hat{P}_{Ract} + ikv \hat{P}_{Ract} + \frac{\alpha}{2} (\hat{P}_{Ract} - \hat{P}_{Lact}) = \\ &- [-D_T k^2 (1-e^{-2\gamma t})] \hat{P}_{Ract} - \gamma k \frac{\partial}{\partial k} \hat{P}_{Ract} - D_T k^2 \hat{P}_{Ract}, \end{aligned} \quad (3.32)$$

CAPÍTULO 3. MOVIMIENTO ACTIVO CONFINADO SUJETO A FLUCTUACIONES TÉRMICAS

y finalmente obtenemos la siguiente ecuación simplificando aún más los términos

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{P}_{Ract} + ikv \hat{P}_{Ract} + \frac{\alpha}{2} [\hat{P}_{Ract} - \hat{P}_{Lact}] = -\gamma k \frac{\partial}{\partial k} \hat{P}_{Ract}. \quad (3.33)$$

Entonces, si seguimos este proceso de sustituir las expresiones (3.28), (3.29) y (3.30) en la ecuación (3.26), obtenemos de manera análoga la siguiente ecuación

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{P}_{Lact} - ikv \hat{P}_{Lact} + \frac{\alpha}{2} [\hat{P}_{Lact} - \hat{P}_{Ract}] = -\gamma k \frac{\partial}{\partial k} \hat{P}_{Lact}. \quad (3.34)$$

Ahora, si definimos

$$\hat{P} = \hat{P}_R + \hat{P}_L, \quad (3.35)$$

la solución general en el espacio de Fourier estaría dada por

$$\hat{P} = e^{-\frac{D_T k^2}{2\gamma}(1-e^{-2\gamma t})} \hat{P}_{act}, \quad (3.36)$$

con

$$\hat{P}_{act} = \hat{P}_{Ract} + \hat{P}_{Lact} \quad (3.37)$$

por lo que la solución en el espacio *real* está dada por la convolución

$$P(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' G(x - x', t) P_{act}(x', t). \quad (3.38)$$

Entonces, si sumamos las ecuaciones (3.25) y (3.26) empleando la expresión (3.35), se tiene que

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \hat{P} + ikv[\hat{P}_R - \hat{P}_L] + \frac{\alpha}{2} [\hat{P}_R - \hat{P}_L + \hat{P}_L - \hat{P}_R] &= -\gamma k \frac{\partial}{\partial k} \hat{P} - D_T k^2 \hat{P} \\ \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \hat{P} + ikv[\hat{P}_R - \hat{P}_L] &= -\gamma k \frac{\partial}{\partial k} \hat{P} - D_T k^2 \hat{P}, \end{aligned} \quad (3.39)$$

y aplicando transformada de Fourier inversa a (3.39) obtenemos la siguiente expresión

$$\frac{\partial}{\partial t} P + \frac{\partial}{\partial x} [v(P_R - P_L) - \gamma x P - D_T \frac{\partial}{\partial x} P] = 0, \quad (3.40)$$

la cual nos conduce a una ecuación de continuidad de la forma

$$\frac{\partial}{\partial t} P + \frac{\partial}{\partial x} J = 0, \quad (3.41)$$

definiendo

$$J = v(P_R - P_L) - \gamma x P - D_T \frac{\partial}{\partial x} P \quad (3.42)$$

como el flujo de corriente de probabilidad, así que si consideramos

$$J = J_a + J_{o-u}, \quad (3.43)$$

donde dicho flujo tiene una contribución activa y una de "Ornstein-Uhlenbeck" debido al término difusivo, tenemos que

$$J_a = v[P_R - P_L], \quad (3.44)$$

$$J_{o-u} = -\gamma x P - D_T \frac{\partial}{\partial x} P, \quad (3.45)$$

de modo que si aplicamos transformada de Fourier a las expresiones (3.44) y (3.45), éstas son de la forma

$$\hat{J}_a = v[\hat{P}_R - \hat{P}_L] = v e^{-\frac{D_T k^2}{2\gamma}(1-e^{-2\gamma t})} [\hat{P}_{Ract} - \hat{P}_{Lact}] = e^{-\frac{D_T k^2}{2\gamma}(1-e^{-2\gamma t})} \hat{J}_{act}, \quad (3.46)$$

$$\hat{J}_{o-u} = -i\gamma \frac{\partial}{\partial k} \hat{P} - ik D_T \hat{P}, \quad (3.47)$$

donde en el resultado (3.46) se emplearon las expresiones dadas en (3.27) para definir

$$\hat{J}_{act} \equiv v(\hat{P}_{Ract} - \hat{P}_{Lact}), \quad (3.48)$$

y poder deducir que la parte activa de este flujo de probabilidad se puede obtener mediante una convolución en el espacio *real* dada por

$$J_a(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x - x', t) J_{act}(x', t) dx. \quad (3.49)$$

Entonces, si consideramos los resultados (3.46) y (3.47) en la ecuación (3.40), tenemos que

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \hat{P} + ik[v(\hat{P}_R - \hat{P}_L) - i\gamma \frac{\partial}{\partial k} \hat{P} - ik D_T \hat{P}] &= 0 \\ \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \hat{P} + ik(\hat{J}_{act} + \hat{J}_{o-u}) &= 0 \\ \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \hat{P} + ik\hat{J} &= 0, \end{aligned} \quad (3.50)$$

definiendo así

$$\hat{J} = \hat{J}_a + \hat{J}_{o-u}. \quad (3.51)$$

Retomando que la solución propuesta para la densidad de probabilidad \hat{P}_i con $i = R, L$, está dada en (3.28) y que al emplearla en las ecuaciones (3.25) y (3.26), se llegó al siguiente sistema de ecuaciones que debemos resolver para encontrar una expresión para la parte activa de dicha solución

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{P}_{Ract} + ikv\hat{P}_{Ract} + \frac{\alpha}{2} [\hat{P}_{Ract} - \hat{P}_{Lact}] = -\gamma k \frac{\partial}{\partial k} \hat{P}_{Ract}, \quad (3.52)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{P}_{Lact} - ikv\hat{P}_{Lact} + \frac{\alpha}{2} [\hat{P}_{Lact} - \hat{P}_{Ract}] = -\gamma k \frac{\partial}{\partial k} \hat{P}_{Lact}, \quad (3.53)$$

CAPÍTULO 3. MOVIMIENTO ACTIVO CONFINADO SUJETO A FLUCTUACIONES TÉRMICAS

en el cual si seguimos el desarrollo planteado en el capítulo 2 sobre el caso del análisis de materia activa confinada por un potencial armónico para la solución de este sistema de ecuaciones, se tiene lo siguiente. Se consideran las misma condición inicial que en dicho caso mencionado

$$P_i(x, 0) = \frac{1}{2}\delta(x) \quad (3.54)$$

y la misma condición de frontera

$$P_i(x \rightarrow \infty, t) = 0, \quad (3.55)$$

con $i = R, L$. Si aplicamos transformada de Laplace a (3.52) y (3.53), dada en (2.69), tenemos que

$$-\frac{1}{2}\delta(x) + s\bar{P}_R + ikv\bar{P}_R + \frac{\alpha}{2}[\bar{P}_R - \bar{P}_L] = -\gamma k \frac{\partial}{\partial k} \bar{P}_R, \quad (3.56)$$

$$-\frac{1}{2}\delta(x) + s\bar{P}_L + ikv\bar{P}_L + \frac{\alpha}{2}[\bar{P}_L - \bar{P}_R] = -\gamma k \frac{\partial}{\partial k} \bar{P}_L. \quad (3.57)$$

Reordenando estas dos últimas expresiones tenemos que

$$\gamma k \frac{\partial}{\partial k} \bar{P}_R + \left[\frac{\alpha}{2} + ikv + s \right] \bar{P}_R - \frac{\alpha}{2} \bar{P}_L = \frac{1}{2} \delta(x), \quad (3.58)$$

$$\gamma k \frac{\partial}{\partial k} \bar{P}_L + \left[\frac{\alpha}{2} - ikv + s \right] \bar{P}_L - \frac{\alpha}{2} \bar{P}_R = \frac{1}{2} \delta(x). \quad (3.59)$$

Concentrándonos en el caso estacionario, para conocer la expresión de la distribución estacionaria $P(x)$ recurrimos a considerar la expresión (3.38) para este caso, la cual toma la forma

$$P(x) = \int_{-\frac{v}{\gamma}}^{\frac{v}{\gamma}} dx' G(x - x') P_{act}(x'), \quad (3.60)$$

en el intervalo $[-v/\gamma, v/\gamma]$, ya que P_{act} sólo está definida en dicha región, como se mostró en el capítulo anterior; $G(x)$ es el propagador, dado por la transformada inversa de Fourier del término difusivo de la solución propuesta en (3.36) en dicho régimen estacionario, dado por

$$e^{-\frac{D_T k^2}{2\gamma}}, \quad (3.61)$$

por lo que determinando dicho propagador, tenemos que

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} e^{-\frac{D_T k^2}{2\gamma}} &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx - \frac{D_T k^2}{2\gamma} + \frac{\gamma x^2}{2D_T} - \frac{\gamma x^2}{2D_T}} = \\ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\left(ikx + \frac{D_T k^2}{2\gamma} - \frac{\gamma x^2}{2D_T}\right)} e^{-\frac{\gamma x^2}{2D_T}} &= \frac{e^{-\frac{\gamma x^2}{2D_T}}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\left(\sqrt{\frac{D_T}{2\gamma}} k - i\sqrt{\frac{\gamma}{2D_T}} x\right)^2}, \end{aligned} \quad (3.62)$$

hacemos el cambio de variable

$$z = \sqrt{\frac{D_T}{2\gamma}}k - i\sqrt{\frac{\gamma}{2D_T}}x, \quad (3.63)$$

lo que implica que

$$dk = \sqrt{\frac{2\gamma}{D_T}}dz; \quad (3.64)$$

teniendo entonces que

$$G(x) = \frac{e^{-\frac{\gamma x^2}{2D_T}}}{2\pi} \sqrt{\frac{2\gamma}{D_T}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-z^2} = \frac{e^{-\frac{\gamma x^2}{2D_T}}}{2\pi} \sqrt{\frac{2\gamma}{D_T}} \sqrt{\pi} = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi D_T}} e^{-\frac{\gamma x^2}{2D_T}}. \quad (3.65)$$

Observamos que para determinar el propagador integramos sobre todo el espacio, esto porque el efecto de las fluctuaciones térmicas se considera en toda esta región y no sólo en la de confinamiento definida por el potencial armónico. Por otro lado, recordando el término *activo* involucrado en (3.60) en el régimen estacionario, corresponde al ya determinado en el capítulo 2 para el caso de un ensamble de partículas activas "run-and-tumble" confinadas por un potencial armónico, el cual está dado por

$$P_{act}(x) = \frac{2}{4^{\frac{\alpha}{2}} B(\frac{\alpha}{2}; \frac{\alpha}{2})} \frac{\gamma}{v} \left(1 - \left(\frac{\gamma x}{v}\right)^2\right)^{\frac{\alpha}{2}-1}; \quad (3.66)$$

entonces, la distribución de probabilidad estacionaria se determina así a partir de (3.60) considerando (3.65) y (3.66)

$$P(x) = \frac{\gamma}{v} \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi D_T}} \left(\frac{2}{4^{\frac{\alpha}{2}} B(\frac{\alpha}{2}; \frac{\alpha}{2})}\right) \int_{-\frac{v}{\gamma}}^{\frac{v}{\gamma}} dx' e^{-\frac{\gamma(x-x')^2}{2D_T}} \left[1 - \left(\frac{\gamma x'}{v}\right)^2\right]^{\frac{\alpha}{2}-1}. \quad (3.67)$$

Analizando esta última expresión, podemos observar que, para resolver la integral involucrada, es crucial hacerlo considerando diferentes valores para α . Hacemos el siguiente cambio de variable

$$z = -\sqrt{\frac{\gamma}{2D_T}}(x - x'), \quad (3.68)$$

donde

$$dz = \sqrt{\frac{\gamma}{2D_T}} dx' \quad (3.69)$$

teniendo que (3.67) toma la forma

$$P(x) = \frac{2\gamma}{4^{\frac{\alpha}{2}} v \sqrt{\pi} B(\frac{\alpha}{2}; \frac{\alpha}{2})} \int_{-\sqrt{\frac{\gamma}{2D_T}}(\frac{v}{\gamma}+x)}^{\sqrt{\frac{\gamma}{2D_T}}(\frac{v}{\gamma}-x)} dz e^{-z^2} \left[1 - \frac{2\gamma D_T}{v^2} z^2 - \frac{2x\gamma}{v} \left(\frac{\sqrt{2\gamma D_T}}{v}\right) z - \left(\frac{x\gamma}{v}\right)^2\right]^{\frac{\alpha}{2}-1} \quad (3.70)$$

CAPÍTULO 3. MOVIMIENTO ACTIVO CONFINADO SUJETO A FLUCTUACIONES TÉRMICAS

Para el caso más simple, que corresponde al de $\bar{\alpha} = 2$, tenemos que

$$P(x) = \frac{\gamma}{2v\sqrt{\pi}B(1;1)} \int_{-\sqrt{\frac{\gamma}{2D_T}}(\frac{v}{\gamma}+x)}^{\sqrt{\frac{\gamma}{2D_T}}(\frac{v}{\gamma}-x)} dz e^{-z^2}, \quad (3.71)$$

donde al resolver la integral involucrada, llegamos a que

$$P(x) = \frac{\gamma}{4vB(1;1)} \left[\operatorname{erf}\left(\frac{v}{\sqrt{2D_T}\gamma} \left(1 - \frac{x\gamma}{v}\right)\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{v}{\sqrt{2D_T}\gamma} \left(1 + \frac{x\gamma}{v}\right)\right) \right]. \quad (3.72)$$

Con el fin de observar el comportamiento de la distribución adimensionalizada para este primer caso, donde para ello se define el parámetro d como

$$d \equiv \frac{\sqrt{2\gamma D_T}}{v}, \quad (3.73)$$

que se encuentra en las expresiones de las distribuciones estacionarias para cada caso. Como habíamos mencionado, nuestro objetivo es saber cómo evoluciona la distribución de probabilidad estacionaria al considerar los efectos de las fluctuaciones térmicas y cómo repercute su contribución en la actividad de nuestro ensamble de partículas “run-and-tumble”; para ello variaremos el parámetro adimensional D_T/D_{act} , el cual se relaciona con d de la siguiente manera

$$d^2 = \left(\frac{\sqrt{2D_T\gamma}}{v}\right)^2 = \frac{2D_T\gamma}{v^2} \left(\frac{\alpha}{\alpha}\right) = \frac{2D_T\alpha}{v^2} \left(\frac{1}{\bar{\alpha}}\right) = \frac{2D_T}{D_{\text{act}}} \left(\frac{1}{\bar{\alpha}}\right), \quad (3.74)$$

considerando que

$$D_{\text{act}} = \frac{v^2}{\alpha}; \quad (3.75)$$

por tanto tenemos que

$$\frac{D_T}{D_{\text{act}}} = \frac{d^2\bar{\alpha}}{2}. \quad (3.76)$$

Otra cantidad importante que pudimos descubrir a partir de (3.67) y en las expresiones analíticas de esta distribución de probabilidad estacionaria para los demás valores de $\bar{\alpha}$, es la longitud de atrapamiento definida por el potencial (l_{trap}), dada por

$$l_{\text{trap}} = \frac{v}{\gamma}, \quad (3.77)$$

la cual se relaciona con la longitud de persistencia (l_{pers}) y $\bar{\alpha}$, de la siguiente manera

$$\frac{l_{\text{trap}}}{l_{\text{pers}}} = \frac{\frac{v}{\gamma}}{\frac{v}{\alpha}} = \frac{\alpha}{\gamma} = \bar{\alpha}. \quad (3.78)$$

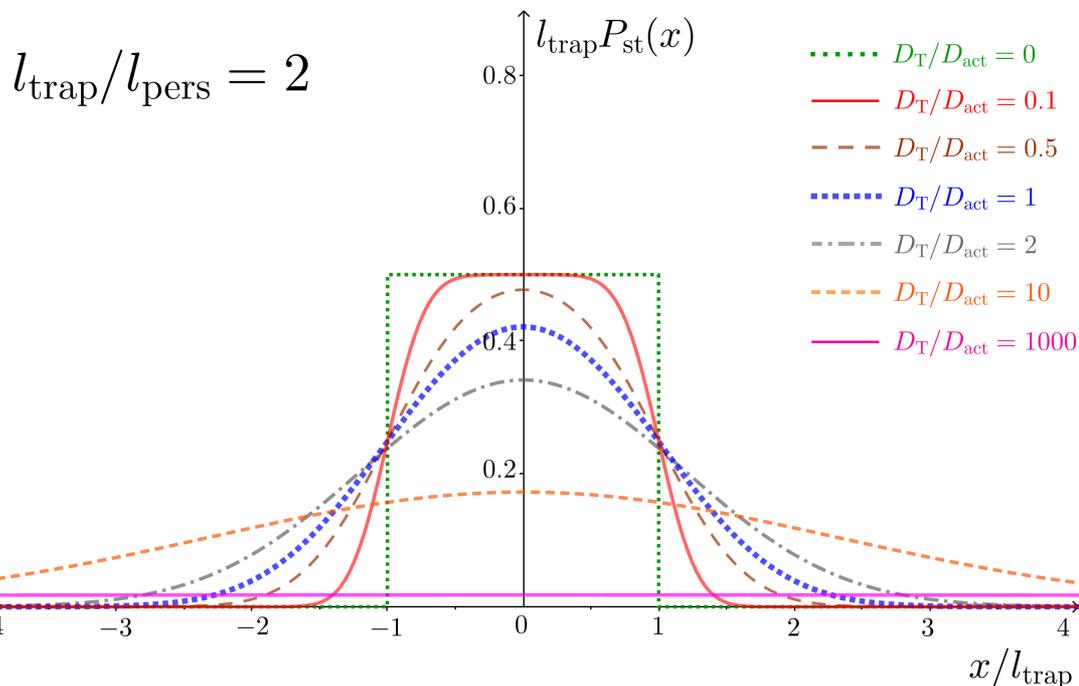


Figura 3.1: Comportamiento de la distribución de probabilidad estacionaria $P(x)$ adimensionalizada, a diferentes valores de D_T/D_{act} y a un valor $l_{\text{trap}}/l_{\text{pers}} = 2$.

Así que reescribiendo (3.72) en términos de estas cantidades, tenemos que

$$P(x) = \frac{1}{4B(1;1)l_{\text{trap}}} \left[\operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{D_{\text{act}}}{D_T}} \left(1 - \frac{x}{l_{\text{trap}}} \right) \right) + \operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{D_{\text{act}}}{D_T}} \left(1 + \frac{x}{l_{\text{trap}}} \right) \right) \right]. \quad (3.79)$$

Podemos observar en la figura 3.1 que al anular D_T recuperamos el comportamiento de la distribución para este mismo caso que se muestra en el capítulo 2 en el que no se considera el término de la difusión térmica, donde se comporta como constante ya que la fuerza de atracción del potencial es contrarrestada por la actividad de las partículas. Conforme va aumentando D_T con respecto a D_{act} , la fuerza de atrapamiento del potencial pierde contribución y las partículas se esparcen saliendo fuera del intervalo de confinamiento, como si, a pesar de que se tiene actividad por parte de las partículas, su distribución se vea mayormente correspondida por las constantes colisiones de las partículas del medio con las partículas “run-and-tumble” debido al aumento de la energía en el sistema.

CAPÍTULO 3. MOVIMIENTO ACTIVO CONFINADO SUJETO A FLUCTUACIONES
TÉRMICAS

Para $\bar{\alpha} = 4$, considerando el cambio de variable (3.68), tenemos que

$$P(x) = \frac{\gamma}{8v\sqrt{\pi}B(2;2)} \int_{-\sqrt{\frac{\gamma}{2D_{\Gamma}}}\left(\frac{v}{\gamma}+x\right)}^{\sqrt{\frac{\gamma}{2D_{\Gamma}}}\left(\frac{v}{\gamma}-x\right)} dz e^{-z^2} \left[1 - \frac{2\gamma D_{\Gamma}}{v^2} z^2 - \frac{2x\gamma}{v} \left(\frac{\sqrt{2\gamma D_{\Gamma}}}{v} \right) z - \left(\frac{x\gamma}{v} \right)^2 \right]. \quad (3.80)$$

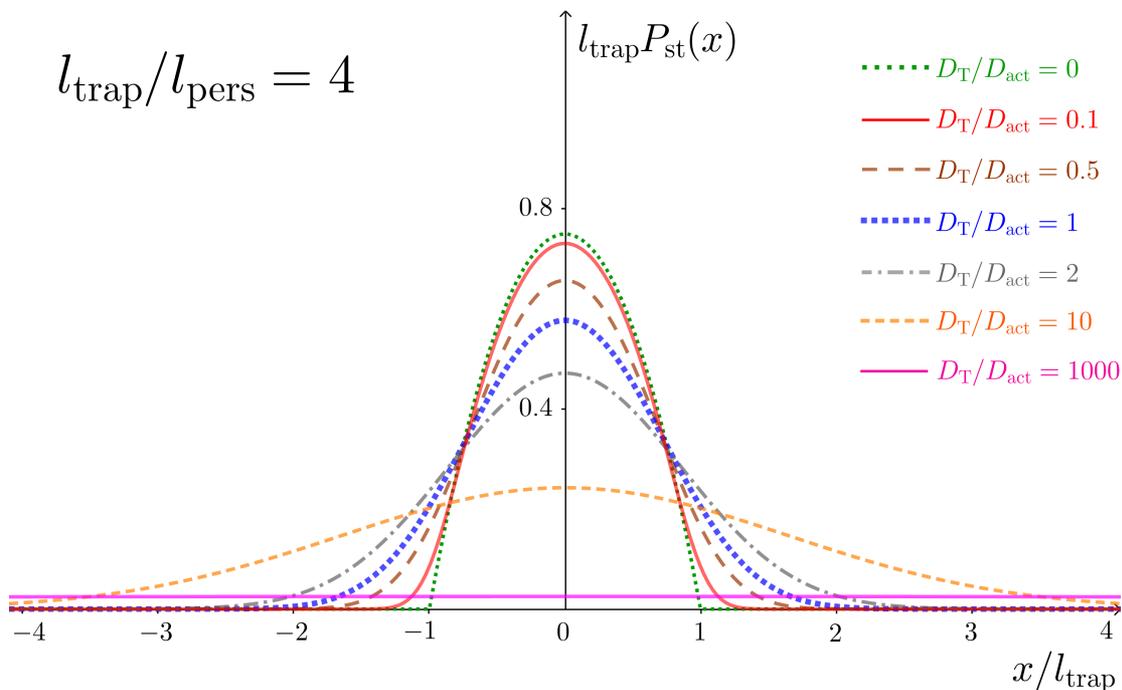


Figura 3.2: Comportamiento de la distribución de probabilidad estacionaria $P(x)$ adimensionalizada, a diferentes valores de $D_{\Gamma}/D_{\text{act}}$ y a un valor $l_{\text{trap}}/l_{\text{pers}} = 4$.

Cabe mencionar que en las expresiones analíticas de la distribución de probabilidad, para los siguientes casos discretos de $\bar{\alpha}$, se encuentran términos similares los cuales quedarán definidos a continuación como una función que depende de x con el fin de reducir su extensión

$$P_n(x) \equiv e^{-\left(\frac{v}{\sqrt{2D_{\Gamma}\gamma}}\left(1-\frac{x\gamma}{v}\right)\right)^2} \left(1-\frac{x\gamma}{v}\right)^n - (-1)^n e^{-\left(\frac{v}{\sqrt{2D_{\Gamma}\gamma}}\left(1+\frac{x\gamma}{v}\right)\right)^2} \left(1+\frac{x\gamma}{v}\right)^n, \quad (3.81)$$

con $n \in \mathbb{N}$, donde al resolver la integral en (3.80), se llega a lo siguiente considerando (3.81)

$$P(x) = \frac{\gamma}{8v\sqrt{\pi}B(2;2)} \left\{ \left[\frac{\sqrt{\pi}}{2} - \frac{\gamma D_{\text{T}}\sqrt{\pi}}{2v^2} - \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(\frac{x\gamma}{v} \right)^2 \right] \left[\operatorname{erf} \left(\frac{v}{\sqrt{2D_{\text{T}}\gamma}} \left(1 - \frac{x\gamma}{v} \right) \right) + \operatorname{erf} \left(\frac{v}{\sqrt{2D_{\text{T}}\gamma}} \left(1 + \frac{x\gamma}{v} \right) \right) \right] + \frac{\sqrt{2\gamma D_{\text{T}}}}{2v} P_1(x) + \frac{x\gamma}{v} \left(\frac{\sqrt{2\gamma D_{\text{T}}}}{v} \right) P_0(x) \right\}. \quad (3.82)$$

Reescribiendo esta expresión en términos de las equivalencias dadas en (3.76) y (3.78), tenemos que

$$P(x) = \frac{1}{8\sqrt{\pi}B(2;2)l_{\text{trap}}} \left\{ \left[\frac{\sqrt{\pi}}{2} - \frac{D_{\text{T}}\sqrt{\pi}}{8D_{\text{act}}} - \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(\frac{x}{l_{\text{trap}}} \right)^2 \right] \left[\operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{2D_{\text{act}}}{D_{\text{T}}}} \left(1 - \frac{x}{l_{\text{trap}}} \right) \right) + \operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{2D_{\text{act}}}{D_{\text{T}}}} \left(1 + \frac{x}{l_{\text{trap}}} \right) \right) \right] + \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{D_{\text{T}}}{2D_{\text{act}}}} \right) P_1(x) + \frac{x}{l_{\text{trap}}} \left(\sqrt{\frac{D_{\text{T}}}{2D_{\text{act}}}} \right) P_0(x) \right\}. \quad (3.83)$$

En la figura 3.2 podemos observar el comportamiento de la distribución de probabilidad estacionaria para este caso de $\bar{\alpha} = 4$ en el que en primera instancia podemos notar que se recupera la forma de esta para $D_{\text{T}} = 0$ como lo mostramos en el capítulo anterior, donde al ser $\bar{\alpha} > 2$, la longitud de persistencia es menor a la longitud de confinamiento y por ello, la contribución del potencial es mayor que la actividad del ensamble de partículas, obteniendo un comportamiento parecido al de una gaussiana. Notamos que conforme D_{T} aumenta con respecto a D_{act} , el potencial pierde contribución debido a las fluctuaciones térmicas y por el aumento de la energía en el sistema, las partículas logran cruzar los puntos frontera y su movimiento puede estar mayormente contribuido por las colisiones incesantes con las moléculas del fluido.

Para $\bar{\alpha} = 6$, con el cambio de variable (3.68), tenemos que

$$P(x) = \frac{\gamma}{32v\sqrt{\pi}B(3;3)} \int_{-\sqrt{\frac{\gamma}{2D_{\text{T}}}} \left(\frac{x}{\gamma} + x \right)}^{\sqrt{\frac{\gamma}{2D_{\text{T}}}} \left(\frac{x}{\gamma} - x \right)} dz e^{-z^2} \left[1 - \frac{2\gamma D_{\text{T}}}{v^2} z^2 - \frac{2x\gamma}{v} \left(\frac{\sqrt{2\gamma D_{\text{T}}}}{v} \right) z - \left(\frac{x\gamma}{v} \right)^2 \right]^2, \quad (3.84)$$

donde al resolver la integral, obtenemos

$$P(x) = \frac{\gamma}{32v\sqrt{\pi}B(3;3)} \left\{ \left[\frac{1}{2} - \left(\frac{x\gamma}{v} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{x\gamma}{v} \right)^4 + \frac{3\gamma D_{\text{T}}}{v^2} \left(\frac{x\gamma}{v} \right)^2 - \frac{\gamma D_{\text{T}}}{v^2} + \frac{3\gamma^2 D_{\text{T}}^2}{2v^4} \right] \cdot \left(\sqrt{\pi} \left[\operatorname{erf} \left(\frac{v}{\sqrt{2\gamma D_{\text{T}}}} \left[1 - \frac{x\gamma}{v} \right] \right) + \operatorname{erf} \left(\frac{v}{\sqrt{2\gamma D_{\text{T}}}} \left[1 + \frac{x\gamma}{v} \right] \right) \right] \right) - \left(\frac{2\sqrt{2\gamma D_{\text{T}}}}{v} \left(\frac{x\gamma}{v} \right)^3 - \frac{2\gamma x}{v} \left(\frac{\sqrt{2\gamma D_{\text{T}}}}{v} \right) + \frac{2x\gamma}{v} \left(\frac{\sqrt{2\gamma D_{\text{T}}}}{v} \right)^3 \right) P_0(x) + \left(\frac{2\gamma D_{\text{T}}}{v^2} - \frac{6\gamma D_{\text{T}}}{v^2} \left(\frac{x\gamma}{v} \right)^2 - 3 \left(\frac{\gamma D_{\text{T}}}{v^2} \right)^2 \right) P_1(x) - \frac{2\gamma x}{v} \left(\frac{\sqrt{2\gamma D_{\text{T}}}}{v} \right)^3 P_2(x) - \frac{2\gamma^2 D_{\text{T}}^2}{v^4} P_3(x) \right\}. \quad (3.85)$$

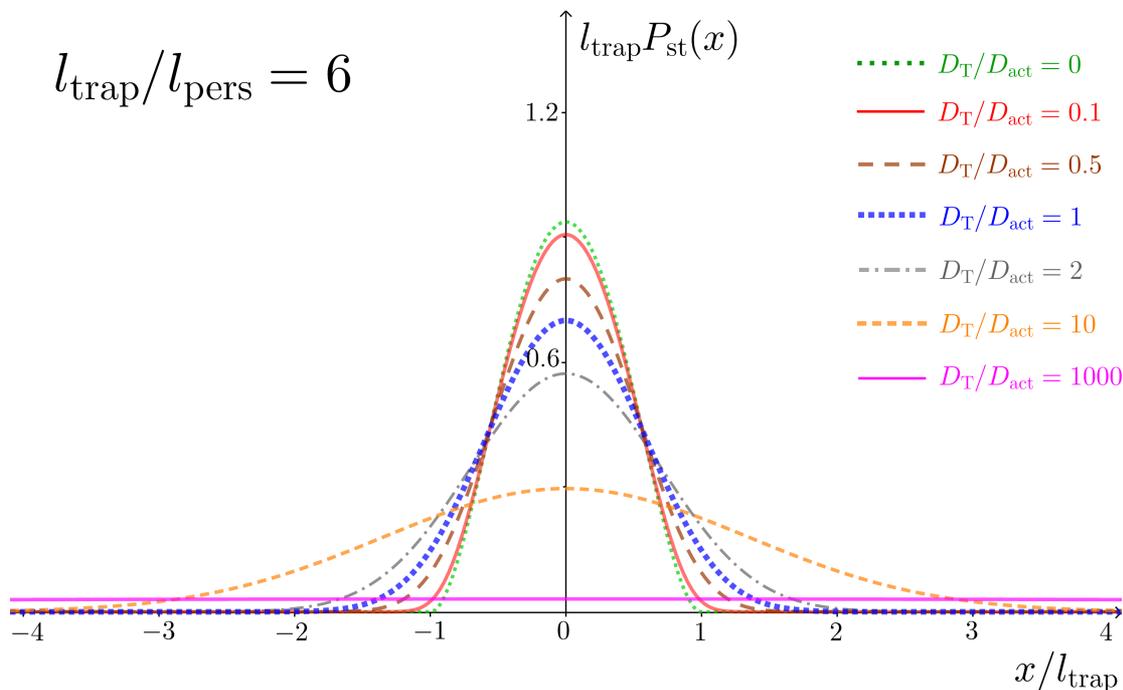


Figura 3.3: Comportamiento de la distribución de probabilidad estacionaria $P(x)$ adimensionalizada, a diferentes valores de D_T/D_{act} y a un valor de $l_{\text{trap}}/l_{\text{pers}} = 6$.

Si a esta última expresión la ponemos en términos de las equivalencias exhibidas en (3.76) y (3.78), tenemos que

$$\begin{aligned}
 P(x) = \frac{1}{32\sqrt{\pi}B(3;3)l_{\text{trap}}} & \left\{ \left[\frac{1}{2} - \frac{x^2}{l_{\text{trap}}^2} + \frac{1}{2} \frac{x^4}{l_{\text{trap}}^4} + \frac{D_T}{2D_{\text{act}}} \frac{x^2}{l_{\text{trap}}^2} - \frac{D_T}{6D_{\text{act}}} + \frac{D_T^2}{24D_{\text{act}}^2} \right] \cdot \right. \\
 \left. \left\{ \sqrt{\pi} \left[\text{erf} \left(\sqrt{\frac{3D_{\text{act}}}{D_T}} \left[1 - \frac{x}{l_{\text{trap}}} \right] \right) + \text{erf} \left(\sqrt{\frac{3D_{\text{act}}}{D_T}} \left[1 + \frac{x}{l_{\text{trap}}} \right] \right) \right] \right\} - \left(2\sqrt{\frac{D_T}{3D_{\text{act}}}} \frac{x^3}{l_{\text{trap}}^3} \right. \right. \\
 - \frac{2x}{l_{\text{trap}}} \sqrt{\frac{D_T}{3D_{\text{act}}}} + \frac{2x}{l_{\text{trap}}} \left(\frac{D_T}{3D_{\text{act}}} \right)^{\frac{3}{2}} & \left. \left. \right) P_0(x) + \left(\frac{D_T}{3D_{\text{act}}} - \frac{D_T}{D_{\text{act}}} \frac{x^2}{l_{\text{trap}}^2} \right. \right. \\
 \left. \left. - \frac{D_T^2}{12D_{\text{act}}^2} \right) P_1(x) - \frac{2x}{l_{\text{trap}}} \left(\frac{D_T}{3D_{\text{act}}} \right)^{\frac{3}{2}} P_2(x) - \frac{D_T^2}{18D_{\text{act}}^2} P_3(x) \right\}. \quad (3.86)
 \end{aligned}$$

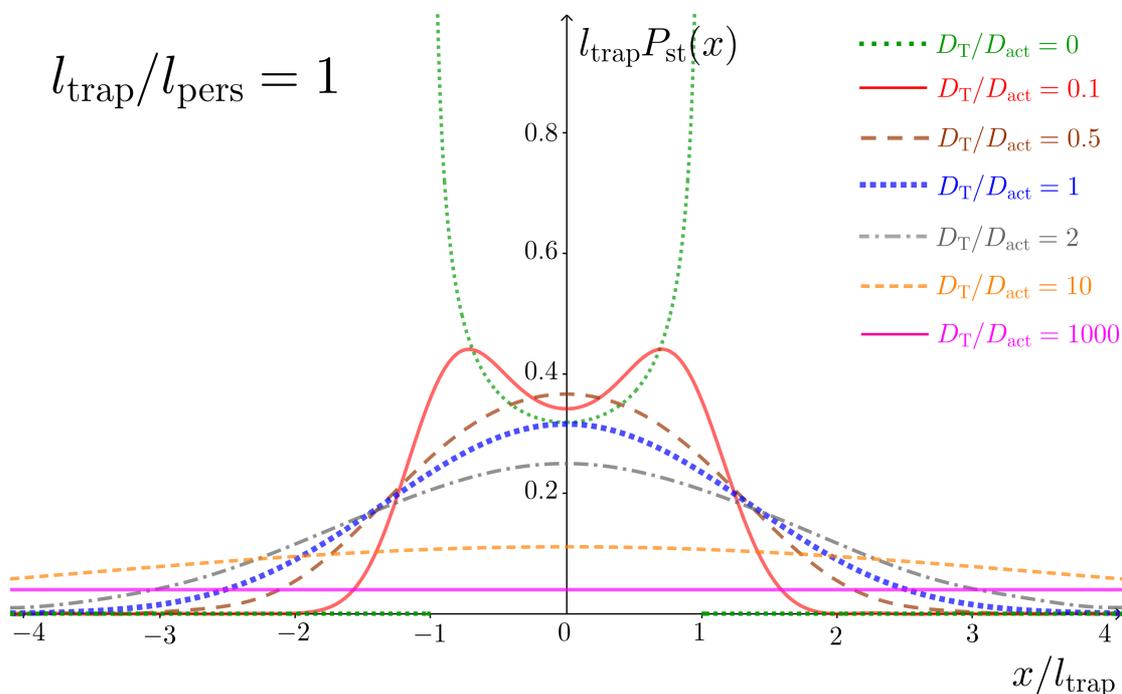


Figura 3.4: Comportamiento de la distribución de probabilidad estacionaria $P(x)$ adimensionalizada, a diferentes valores de d y a un valor de $\bar{\alpha} = 1$.

En la figura 3.3 se puede observar el comportamiento de la distribución para este caso donde podemos observar los mismos cambios para el caso anterior; lo interesante podemos notarlo en la figura 3.4 (gráfica que se obtuvo al resolver de manera numérica el caso $\bar{\alpha} = 1$), donde se puede observar que las partículas se confinan en mayor medida en las “fronteras” del intervalo cuando no se consideran los efectos de las fluctuaciones térmicas, de modo que el efecto de la actividad tiene mayor contribución que la fuerza debida al potencial; conforme comenzamos a aumentar el valor del coeficiente de difusión térmica, podemos notar ya un cambio drástico en la distribución de probabilidad desde que $D_{\text{T}}/D_{\text{act}} = 0,1$, teniendo aún un acumulamiento de partículas en los puntos “frontera” del potencial, así como también un ligero aumento en el centro y a su vez partículas saliendo de los límites definidos esparciéndose en todo el espacio unidimensional. Para valores finitos de $D_{\text{T}}/D_{\text{act}}$ mayores o iguales a 2, notamos que ya no existe esa acumulación de partículas en los límites y solamente en el centro por la presencia del potencial, pero al aumentarse la energía en el sistema, las partículas ya se encuentran fuera de las “fronteras” como si este efecto de las fluctuaciones térmicas adquiriera mayor contribución para su distribución en todo el espacio; como se mencionó anteriormente, sigue habiendo presencia de actividad por parte de las partículas pero las incesantes

colisiones de éstas con las moléculas del medio tienen mayor impacto que la fuerza atractiva debida al potencial y provocan que tengan ese comportamiento.

3.2. Temperatura efectiva

Como mencionamos anteriormente, uno de los objetivos fundamentales de este proyecto es poder conocer qué tan alejado del equilibrio termodinámico se encuentra nuestro sistema de interés que considera el efecto de las fluctuaciones térmicas, y para ello, procedemos inicialmente a hacer un “mapeo” de dicho sistema suponiendo que tenemos un ensamble de partículas Brownianas pasivas sumergidas en un baño térmico inhomogéneo¹, logrando obtener un “perfil de temperatura efectivo” del medio que nos muestre el grado de inhomogeneidad y desequilibrio que tiene el sistema. Cabe mencionar que este concepto de perfil de temperatura se sigue del análisis que inició Einstein sobre movimiento Browniano, donde pudo determinar una expresión de la temperatura del medio en el que se encontraban sumergidas las partículas, dada en (1.17). Claramente podemos notar que la temperatura está en términos del coeficiente de difusión D , por lo que no era difícil argumentar que existía un perfil de temperatura que dependiera de dos coeficientes de difusión presentes en nuestro sistema: el coeficiente de difusión efectivo D_{act} y el coeficiente de difusión térmico D_T . En primera instancia se tenía la idea de que el perfil podía ser la suma de un perfil debido a la actividad más un perfil debido al medio, pero observaremos más adelante que el resultado no era así trivial. Otro argumento importante de mencionarse, es el hecho de que esta temperatura efectiva no tiene como tal el sentido físico de una temperatura termodinámica, sino que sólo es un perfil que nos describe el grado de no equilibrio del sistema seguido del desarrollo del estudio del movimiento Browniano, como se comentó anteriormente.

Ya que nuestro fin es conocer una expresión analítica de dicho perfil de temperatura efectivo T tras un mapeo, recurrimos a la expresión de la distribución de probabilidad estacionaria de un ensamble de partículas Brownianas que se encuentra en términos de un perfil de temperatura $T(x)$ y de un potencial armónico de confinamiento, dada por [39]

$$P(x) = \frac{\text{const}}{T(x)} \exp \left[- \int^x \frac{V'(y)}{k_B T(y)} dy \right], \quad (3.87)$$

y procedemos a hacer lo siguiente en esta expresión (3.87)

$$\log \left[\frac{T(x)P(x)}{\text{const}} \right] = - \int^x \frac{V'(y)}{k_B T(y)} dy, \quad (3.88)$$

donde al derivar tenemos que

$$\frac{T'(x)P(x) + P'(x)T(x)}{T(x)P(x)} = - \frac{V'(x)}{k_B T(x)}, \quad (3.89)$$

¹Inhomogeneidad debida a la actividad de las partículas.

obteniendo que

$$T'(x) + \frac{P'(x)}{P(x)}T(x) = -\frac{mw^2}{k_B}x. \quad (3.90)$$

A esta última ecuación la expresamos de la siguiente manera con el fin de encontrar una solución para $T(x)$

$$T'(x) + \left(\frac{d}{dx} \log(P(x)) \right) T(x) = -\frac{mw^2}{k_B}x. \quad (3.91)$$

Sabemos que la solución de una ecuación diferencial inhomogénea de primer orden como la que tenemos que (3.83) está dada como se muestra en A.4. Por tanto, la solución general para $T(x)$ está dada por

$$T(x) = \frac{1}{P(x)} \left[\int P(x) \left(-\frac{mw^2x}{k_B} \right) dx + C \right], \quad (3.92)$$

donde $P(x)$ está dada en su forma general en (3.67). Con el fin de conocer más a fondo el comportamiento de este perfil de temperatura, procedemos a analizar cada uno de los casos en los que se consideran valores discretos de $\bar{\alpha}$ como se realizó para la distribución de probabilidad. Abordando el caso $\bar{\alpha} = 2$, tomamos la distribución de probabilidad dada en (3.79) que corresponde a este caso, observando que la integral en (3.92) toma la forma

$$\frac{mw^2}{4k_B B(1;1)l_{\text{trap}}} \int - \left[\operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{D_{\text{act}}}{D_{\text{T}}}} \left(1 - \frac{x}{l_{\text{trap}}} \right) \right) + \operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{D_{\text{act}}}{D_{\text{T}}}} \left(1 + \frac{x}{l_{\text{trap}}} \right) \right) \right] x dx, \quad (3.93)$$

cuya solución es

$$l_{\text{trap}}^2 \left\{ \left[-\frac{x^2}{2l_{\text{trap}}^2} + \frac{1}{2} + \frac{D_{\text{T}}}{4D_{\text{act}}} \right] \left[\operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{D_{\text{act}}}{D_{\text{T}}}} \left(1 - \frac{x}{l_{\text{trap}}} \right) \right) + \operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{D_{\text{act}}}{D_{\text{T}}}} \left(1 + \frac{x}{l_{\text{trap}}} \right) \right) \right] \right. \\ \left. + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{D_{\text{T}}}{D_{\text{act}}}} e^{-\frac{D_{\text{act}}}{D_{\text{T}}} \left(1 + \frac{x}{l_{\text{trap}}} \right)^2} \left[e^{\frac{4D_{\text{act}}x}{D_{\text{T}}l_{\text{trap}}}} + 1 + \frac{x}{l_{\text{trap}}} \left(e^{\frac{4D_{\text{act}}x}{D_{\text{T}}l_{\text{trap}}} - 1} \right) \right] \right\}. \quad (3.94)$$

Entonces, el perfil de temperatura $T(x)$ para este caso a partir de (3.92), tomando en cuenta (3.94) y dividiendo entre (3.79), está dado por

$$T(x) = \frac{mw^2l_{\text{trap}}^2}{k_B} \left\{ \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{D_{\text{T}}}{D_{\text{act}}}} e^{-\frac{D_{\text{act}}}{D_{\text{T}}} \left(1 + \frac{x}{l_{\text{trap}}} \right)^2} \frac{\left[e^{\frac{4D_{\text{act}}x}{D_{\text{T}}l_{\text{trap}}}} + 1 + \frac{x}{l_{\text{trap}}} \left(e^{\frac{4D_{\text{act}}x}{D_{\text{T}}l_{\text{trap}}} - 1} \right) \right]}{\operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{D_{\text{act}}}{D_{\text{T}}}} \left(1 - \frac{x}{l_{\text{trap}}} \right) \right) + \operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{D_{\text{act}}}{D_{\text{T}}}} \left(1 + \frac{x}{l_{\text{trap}}} \right) \right)} \right. \\ \left. - \frac{x^2}{2l_{\text{trap}}^2} + \frac{1}{2} + \frac{D_{\text{T}}}{4D_{\text{act}}} \right\} + \frac{4B(1;1)l_{\text{trap}}C}{\operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{D_{\text{act}}}{D_{\text{T}}}} \left(1 - \frac{x}{l_{\text{trap}}} \right) \right) + \operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{D_{\text{act}}}{D_{\text{T}}}} \left(1 + \frac{x}{l_{\text{trap}}} \right) \right)}; \quad (3.95)$$

CAPÍTULO 3. MOVIMIENTO ACTIVO CONFINADO SUJETO A FLUCTUACIONES TÉRMICAS

si tomamos el límite en el que $D_T \rightarrow 0$, el primer término de (3.95) se anula y seguimos teniendo que

$$T(x) = \lim_{D_T \rightarrow 0} \frac{mw^2 l_{\text{trap}}^2}{k_B} \left[\frac{1}{2} - \frac{x^2}{2l_{\text{trap}}^2} \right] + \frac{4B(1;1)l_{\text{trap}}C}{\text{erf}\left(\sqrt{\frac{D_{\text{act}}}{D_T}}\left(1 - \frac{x}{l_{\text{trap}}}\right)\right) + \text{erf}\left(\sqrt{\frac{D_{\text{act}}}{D_T}}\left(1 + \frac{x}{l_{\text{trap}}}\right)\right)}. \quad (3.96)$$

Debido a que $T(x)$ en este régimen tiene que tener un comportamiento de la forma [35]

$$T(x) = T_0 \left(1 - \frac{x^2}{l_{\text{trap}}^2} \right), \quad (3.97)$$

eso implica que

$$C = 0, \quad (3.98)$$

teniendo que

$$T(x) = \frac{mw^2 l_{\text{trap}}^2}{2k_B} \left(1 - \frac{x^2}{l_{\text{trap}}^2} \right), \quad (3.99)$$

donde

$$T_0 = \frac{mw^2 l_{\text{trap}}^2}{2k_B}, \quad (3.100)$$

lo cual coincide con

$$T_0 = \frac{v^2}{\alpha \mu k_B}, \quad (3.101)$$

ya que

$$l_{\text{trap}}^2 = \frac{v^2}{\gamma^2} \quad (3.102)$$

$$\gamma = mw^2 \mu, \quad (3.103)$$

y

$$\bar{\alpha} = \frac{\alpha}{\gamma} = 2, \quad (3.104)$$

donde esto último implica que

$$\alpha = 2\gamma, \quad (3.105)$$

de modo que (3.100) coincide con (3.101) de la siguiente manera

$$T_0 = \frac{mw^2 v^2}{2\gamma^2 k_B} = \frac{mw^2 \mu v^2}{\alpha \mu \gamma k_B} = \frac{v^2}{\alpha \mu k_B}. \quad (3.106)$$

En la figura 3.5 podemos observar el comportamiento del perfil de temperatura cuando $\bar{\alpha} = 2$, donde vemos que al anular la contribución de las fluctuaciones térmicas, se obtiene el perfil de temperatura obtenido en [35]. Conforme va aumentando ese valor, el perfil aumenta su magnitud pero

se va comportando de manera uniforme en todo el espacio, algo que en principio se esperaba ya que la actividad en ese punto no tiene casi contribución por el valor tan alto de D_T .

Por otro lado, buscamos que el perfil de temperatura se comporte como constante en el régimen en el que $D_T \rightarrow \infty$ ya que se espera que los efectos de la actividad de las partículas se vea absorbida por el efecto de las fluctuaciones térmicas, de modo que el perfil de temperatura debido al mapeo sea parecido al de una partícula Browniana pasiva; esto último porque sabemos que estas partículas no son activas y su movimiento se debe a la colisión con las del medio en el que se encuentran y su trayectoria está intrínsecamente relacionada con la temperatura de éste (difusión térmica).

$$l_{\text{trap}}/l_{\text{pers}} = 2$$

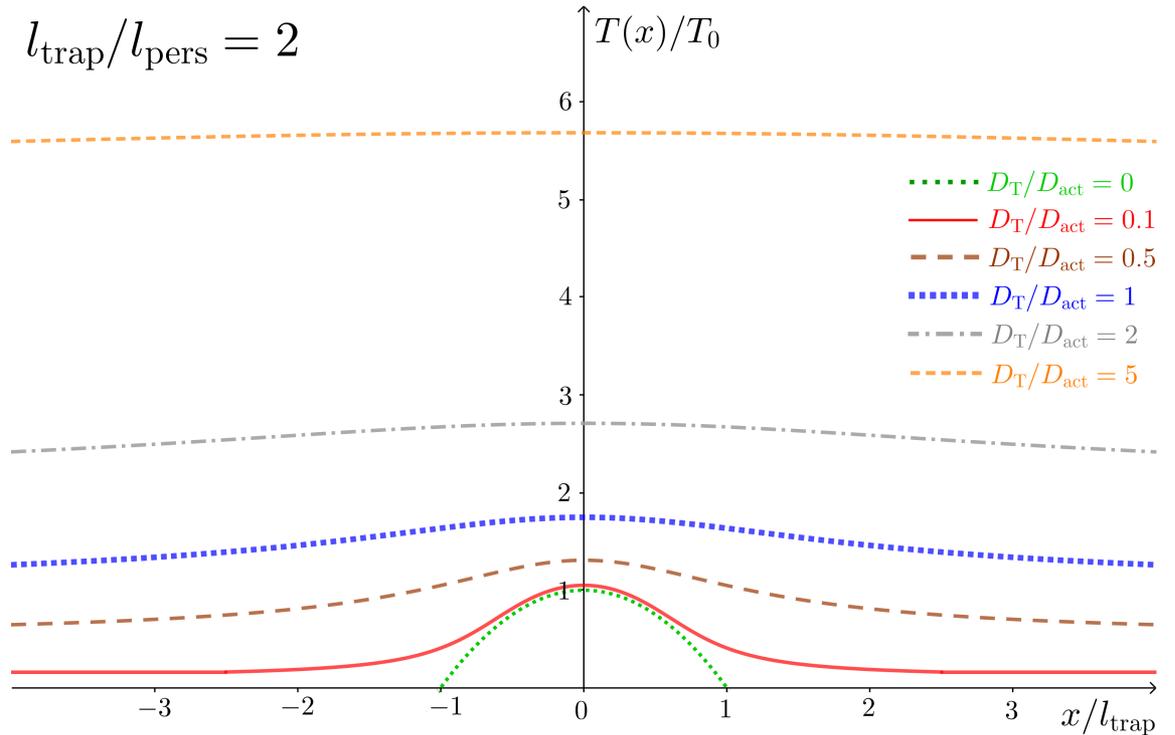


Figura 3.5: Comportamiento del perfil de temperatura $T(x)$ adimensionalizado, a diferentes valores de D_T/D_{act} y a un valor de $\bar{\alpha} = 2$.

Para ello observamos que a partir de (3.67), si consideramos la constante de difusión térmica D_T lo suficientemente grande, el término que involucra este término permanece casi constante en la

CAPÍTULO 3. MOVIMIENTO ACTIVO CONFINADO SUJETO A FLUCTUACIONES TÉRMICAS

convolución, de modo que podemos *sacarlo* de la integral, teniendo que

$$\begin{aligned}
 P(x) &= \frac{\gamma}{v} \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi D_T}} \left(\frac{2}{4^{\frac{\bar{\alpha}}{2}} B(\frac{\bar{\alpha}}{2}; \frac{\bar{\alpha}}{2})} \right) \int_{-\frac{v}{\gamma}}^{\frac{v}{\gamma}} dx' e^{-\frac{\gamma(x-x')^2}{2D_T}} \left[1 - \left(\frac{\gamma x'}{v} \right)^2 \right]^{\frac{\bar{\alpha}}{2}-1} \\
 &\approx \frac{\gamma}{v} \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi D_T}} \left(\frac{2}{4^{\frac{\bar{\alpha}}{2}} B(\frac{\bar{\alpha}}{2}; \frac{\bar{\alpha}}{2})} \right) e^{-\frac{\gamma x^2}{2D_T}} \int_{-\frac{v}{\gamma}}^{\frac{v}{\gamma}} dx' \left[1 - \left(\frac{\gamma x'}{v} \right)^2 \right]^{\frac{\bar{\alpha}}{2}-1}, \quad (3.107)
 \end{aligned}$$

donde a partir de la condición de normalización dada en (2.139), este último resultado se reduce a

$$P(x) = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi D_T}} e^{-\frac{\gamma x^2}{2D_T}}; \quad (3.108)$$

así que si implementamos esta última expresión en (3.92) considerando $C = 0$, tenemos que

$$T(x) = \frac{1}{e^{-\frac{\gamma x^2}{2D_T}}} \int dx e^{-\frac{\gamma x^2}{2D_T}} \left(-\frac{mw^2 x}{k_B} \right), \quad (3.109)$$

por lo tanto al resolver la integral dada en (3.109), se obtiene finalmente que

$$T(x) = \frac{mw^2 D_T}{k_B \gamma} = \frac{D_T}{k_B \mu}, \quad (3.110)$$

que corresponde efectivamente a un perfil de temperatura constante en este régimen. El comportamiento del perfil de temperatura $T(x)$ para este caso en el que $\bar{\alpha} = 2$, puede observarse en la figura 3.5 al considerar diferentes valores de D_T/D_{act} .

Otro perfil de temperatura que resolvimos de manera analítica, pero que no se agrega su expresión debido a lo extensa que es, es el del caso $\bar{\alpha} = 4$, donde el comportamiento del perfil se va dando de manera similar, salvo un aspecto que ocurre a valores finitos de D_T/D_{act} , en el que se va formando una “meseta” en el intervalo de confinamiento por el potencial, posteriormente aumenta su amplitud en esa zona y finalmente se va distribuyendo uniformemente, como se muestra en la figura 3.6. Lo que puede ocurrir físicamente es que el perfil se vuelve un tanto irregular debido a la actividad de las partículas, al potencial externo y a las fluctuaciones térmicas, las cuales se contrarrestan entre sí describiendo tal temperatura en toda esa zona de confinamiento.

Con el fin de conocer más acerca de este perfil de temperatura, procedemos a hacer lo siguiente; observamos que la expresión general para la distribución de probabilidad estacionaria está dada en (3.67), cuya parte activa está definida en (3.66). Si aplicamos el límite en el que $\bar{\alpha}, v \rightarrow \infty$, manteniendo $D_{\text{act}} = v^2/\bar{\alpha}$ constante como se muestra en la sección A.3 del Apéndice, la parte activa

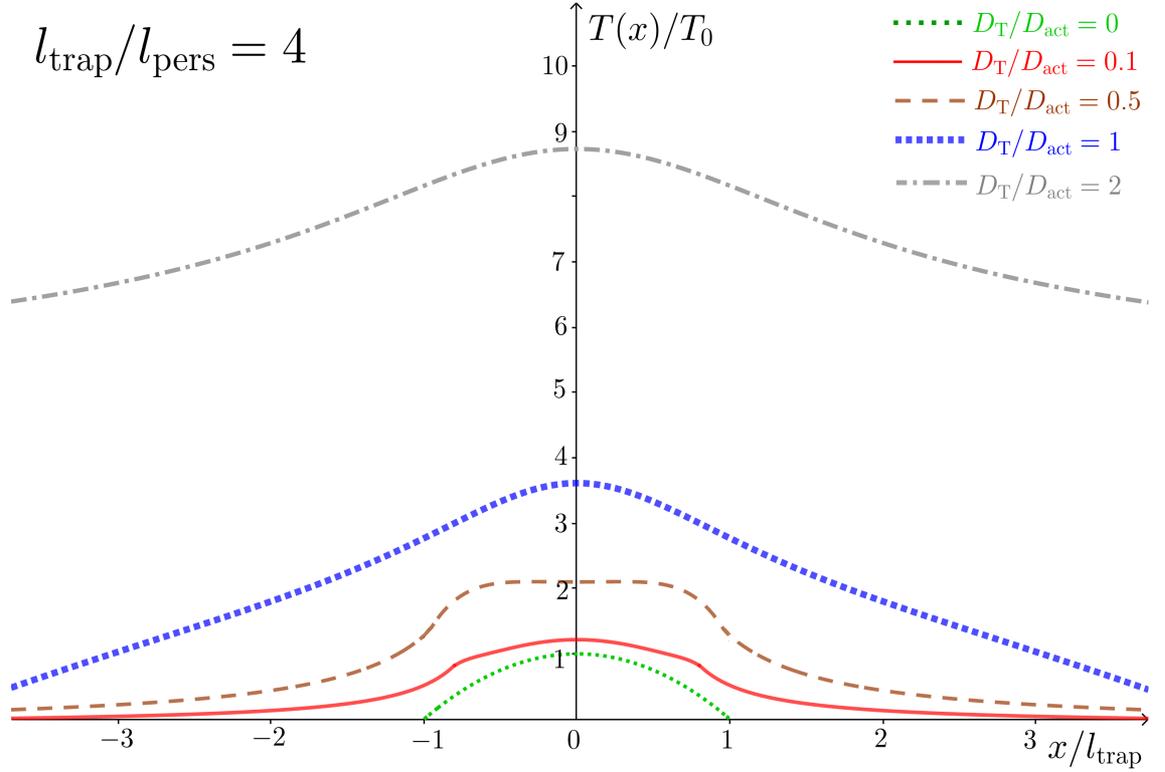


Figura 3.6: Comportamiento del perfil de temperatura $T(x)$ adimensionalizado, a diferentes valores de $D_{\text{T}}/D_{\text{act}}$ y a un valor de $\bar{\alpha} = 4$.

toma la forma de una gaussianana

$$\lim_{v, \alpha \rightarrow \infty} P_{\text{act}}(x) = \frac{2}{4^{\frac{\alpha}{2}} B(\frac{\alpha}{2}; \frac{\alpha}{2})} \frac{\gamma}{v} \left(1 - \left(\frac{\gamma x}{v}\right)^2\right)^{\frac{\alpha}{2}-1} = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi D_{\text{act}}}} e^{-\frac{\gamma x^2}{2D_{\text{act}}}}, \quad (3.111)$$

donde la expresión general para $P(x)$ está dada como

$$P(x) = \frac{\gamma}{2\pi\sqrt{D_{\text{T}}D_{\text{act}}}} \int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{-\frac{\gamma(x-x')^2}{2D_{\text{T}}}} e^{-\frac{\gamma x'^2}{2D_{\text{act}}}}, \quad (3.112)$$

si desarrollamos los exponentes de las exponenciales, obtenemos

$$P(x) = \frac{\gamma}{2\pi\sqrt{D_{\text{T}}D_{\text{act}}}} e^{-\frac{\gamma x^2}{2D_{\text{T}}}} \int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{-\frac{\gamma x'^2}{2} \left(\frac{D_{\text{act}}+D_{\text{T}}}{D_{\text{T}}D_{\text{act}}}\right) + \frac{\gamma x x'}{D_{\text{T}}}}. \quad (3.113)$$

CAPÍTULO 3. MOVIMIENTO ACTIVO CONFINADO SUJETO A FLUCTUACIONES TÉRMICAS

Aplicando el cambio de variable

$$u = x' \sqrt{\frac{\gamma}{2} \left(\frac{D_{\text{act}} + D_{\text{T}}}{D_{\text{T}} D_{\text{act}}} \right)}, \quad (3.114)$$

tenemos que

$$P(x) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\gamma}{2(D_{\text{act}} + D_{\text{T}})}} e^{-\frac{\gamma x^2}{2D_{\text{T}}}} \int_{-\infty}^{\infty} du e^{-u^2 + pu}, \quad (3.115)$$

con

$$p = \frac{\gamma x}{D_{\text{T}}} \sqrt{\frac{2D_{\text{T}} D_{\text{act}}}{\gamma(D_{\text{act}} + D_{\text{T}})}}, \quad (3.116)$$

donde p es una constante con respecto a la integral involucrada en (3.115).

Completando cuadrados en la exponencial de esta expresión, llegamos a que

$$P(x) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\gamma}{2(D_{\text{act}} + D_{\text{T}})}} e^{-\frac{\gamma x^2}{2D_{\text{T}}}} e^{\frac{\gamma D_{\text{act}} x^2}{2D_{\text{T}}(D_{\text{T}} + D_{\text{act}})}} \int_{-\infty}^{\infty} du e^{-(u - \frac{p}{2})^2}, \quad (3.117)$$

obteniendo finalmente que

$$P(x) = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi(D_{\text{act}} + D_{\text{T}})}} e^{\left(-\frac{1}{D_{\text{T}}} + \frac{D_{\text{act}}}{D_{\text{T}}(D_{\text{act}} + D_{\text{T}})}\right) \frac{\gamma x^2}{2}}, \quad (3.118)$$

y simplificando, tenemos que la distribución de probabilidad estacionaria en este régimen, es de la forma

$$P(x) = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi(D_{\text{act}} + D_{\text{T}})}} e^{-\frac{\gamma x^2}{2(D_{\text{act}} + D_{\text{T}})}}. \quad (3.119)$$

Si sustituimos esta última expresión en la ecuación (3.91) que corresponde a la ecuación diferencial a resolver para el perfil de temperatura, vemos que

$$T'(x) + \left(\frac{d}{dx} \log \left(\sqrt{\frac{\gamma}{2\pi(D_{\text{act}} + D_{\text{T}})}} e^{-\frac{\gamma x^2}{2(D_{\text{act}} + D_{\text{T}})}} \right) \right) T(x) = -\frac{mw^2 x}{k_{\text{B}}}, \quad (3.120)$$

llegando a que

$$T'(x) - \frac{\gamma x}{D_{\text{act}} + D_{\text{T}}} T(x) = -\frac{mw^2 x}{k_{\text{B}}}, \quad (3.121)$$

cuya solución es

$$T(x) = \frac{mw^2}{k_{\text{B}} \gamma} (D_{\text{act}} + D_{\text{T}}). \quad (3.122)$$

Notamos que este último resultado nos dice que el perfil de temperatura es constante en el régimen efectivo, donde la difusión total es igual a la suma de ambos coeficientes de difusión, algo que resulta

consistente con la suposición que se tenía de que este perfil de temperatura podría estar en términos de una suma de la contribución de la parte activa más la contribución de las fluctuaciones térmicas; sin embargo pudimos notar que esto sólo sucede en un caso límite en particular, donde las partículas activas se comportan como partículas pasivas con un coeficiente de difusión efectivo.

Capítulo 4

Epílogo

4.1. Resultados y discusiones

El objetivo de este proyecto de tesis fue estudiar un ensamble de partículas activas “run-and-tumble” confinadas por un potencial armónico y sujetas a fluctuaciones térmicas debidas al medio, a partir de la deducción analítica de su distribución de probabilidad; de esta expresión podemos saber la difusión de partículas en una cierta región del espacio y en un determinado momento, así como también algunas propiedades termodinámicas del sistema. Para ello, procedimos previamente a analizar situaciones más “simples” con el fin de predecir y realizar un óptimo análisis. En primera instancia se estudió el comportamiento a partir de la distribución, del caso en el que no se tiene actividad y sólo se consideran las fluctuaciones térmicas sin ningún tipo de confinamiento, que corresponde al movimiento Browniano pasivo libre.

Posteriormente procedimos a estudiar cuatro casos más usuales en la literatura. El primero consistió en un ensamble de partículas Brownianas confinadas por paredes rígidas y el segundo en el mismo ensamble pero ahora confinado por un potencial armónico; los dos casos restantes consistieron en los mismos tipos de constricción empleados ahora para un ensamble de partículas “run-and-tumble”, despreciando los efectos de las fluctuaciones. La relevancia de tomar ambos prospectos de confinamiento radicó en observar la diferencia de la difusión de partículas; para los casos de movimiento Browniano, se obtuvo lo esperado en cuanto a la evolución de su distribución en el régimen temporal; lo aún más interesante ocurrió para los de movimiento “run-and-tumble”, donde debido a la complejidad del método analítico llevado a cabo, se analizó en el espacio de Laplace el caso de paredes rígidas y en el régimen estacionario el caso del potencial armónico.

En las ecuaciones de difusión correspondientes a nuestro problema fundamental se incluyó un término que involucra la difusión térmica, así como las condiciones iniciales y de frontera; sin pérdida de generalidad, se decidió que las partículas partieran desde el origen y, su velocidad de

autopropulsión, así como su tasa de cambio de dirección, fueran constantes. La clave esencial de esta investigación radicó en la solución propuesta para la distribución en el espacio de Fourier, la cual corresponde al producto de un término que involucra la difusión térmica por otro que involucra la actividad; debido a esto, la solución en el espacio real resultó ser la convolución de ambos términos, yéndonos al régimen estacionario para poder encontrar un resultado analítico. La expresión para el término difusivo (“propagador”), definido en todo el espacio real, se determinó a partir de la transformada inversa y el término debido a la actividad se trató de la solución determinada para el caso en el que se tiene confinamiento por el potencial sin considerarse la difusión térmica.

Se observó de manera gráfica el comportamiento de la distribución con respecto a la variación del parámetro D_T/D_{act} , a diferentes valores de l_{trap}/l_{pers} , siendo l_{trap} la longitud de atrapamiento definida por el potencial, l_{pers} la longitud de persistencia característica de este tipo de partículas y D_{act} el coeficiente de difusión efectiva originado por la actividad; al anular D_T/D_{act} se corroboró que la forma de $P(x)$ era la misma que la de las soluciones para el caso resuelto donde se desprecia la difusión térmica, expresiones que al sólo estar definidas en el intervalo de confinamiento definido por el potencial, nos dicen que las partículas permanecen confinadas en esa región pero de diferentes maneras dependiendo el valor de $\bar{\alpha} = l_{trap}/l_{pers}$. Cuando $\bar{\alpha} = 1$, se observó que las partículas se confinan en mayor medida en las “fronteras” del intervalo, de modo que el efecto de la actividad tiene mayor contribución que la fuerza debida al potencial, mientras que para un valor de $\bar{\alpha} = 4, 6$ las partículas se encuentran mayormente atraídas por el potencial confinándose en mayor medida en el punto donde éste se centra; un proceso de transición que tiene lugar entre ambas situaciones es cuando $\bar{\alpha} = 2$, donde el efecto de la actividad se contrarresta con la fuerza del potencial ocasionando que las partículas se distribuyan uniformemente en todo el intervalo de confinamiento.

A partir de que comenzamos a aumentar el valor de D_T/D_{act} , la distribución para todos los valores de $\bar{\alpha}$ tomó forma parecida a la de una gaussiana, de modo que ahora ya se encontraba definida fuera del intervalo debido al “propagador”; posteriormente la amplitud de la distribución empezó a disminuir, de modo que para un valor D_T/D_{act} sumamente grande, la amplitud se volvió infinitesimal implicando que las partículas se distribuyen uniformemente en todo el espacio contrarrestando por completo toda la contribución del potencial. Cabe destacar que en este punto de la investigación, el hecho de hacer $D_T/D_{act} \rightarrow \infty$, resultaba evidente que la fuerza atractiva debida al potencial perdía contribución, pero no se tenía claro si la actividad era un aspecto que se veía contrarrestado o si jugaba un papel importante en relación con la difusión térmica para que las partículas se distribuyeran uniformemente.

Un régimen que se logró explorar en este desarrollo es uno en el que sabemos que al considerar $v, \alpha \rightarrow \infty$ manteniendo $D_{act} = v^2/\alpha = cte$, las partículas “run-and-tumble” se comportan como partículas Brownianas con una constante de difusión efectiva D_{act} y resultó interesante porque la distribución estacionaria exhibió explícitamente que la difusión total es la suma de la difusión térmica debida al medio (D_T) más la difusión efectiva debida a la actividad (D_{act}), un resultado que se había supuesto con anterioridad también para valores finitos de v y α y que se corroboró que

no era tan simple por las expresiones resultantes de dicha distribución. También pudo esclarecerse la interrogante mencionada anteriormente al observar que la distribución es una gaussiana en este régimen donde su amplitud y ancho dependen de la difusión total; si tendemos D_T a infinito, las partículas se distribuyen uniformemente en el espacio teniendo una distribución con amplitud infinitesimal exactamente como el caso en el que α y v son finitos, de modo que la constante D_{act} si es finita o nula no tiene contribución alguna, demostrando que a valores muy grandes de D_T la actividad no repercute en la difusión de partículas.

Finalmente, el último eslabón de esta investigación consistió en hacer un mapeo del ensamble del caso principal, a fin de obtener un perfil de temperatura efectiva como medida de no equilibrio; este desarrollo surge de suponer que el sistema se trata de un ensamble de partículas pasivas sumergidas en un baño térmico no homogéneo que provoca su movimiento y que se origina por la actividad y el efecto de las fluctuaciones. A partir de la distribución, se encontró que para los casos en los que $\bar{\alpha} = 2, 4$, el perfil adquiere un comportamiento interesante a un valor finito de D_T/D_{act} ; al anular este último en todos estos casos, $T(x)$ toma el mismo comportamiento que el perfil del mismo ensamble confinado por un potencial armónico deducido en [35]. Por otro lado, cuando $D_T/D_{\text{act}} \rightarrow \infty$ para todos los casos, el perfil de temperatura tiende a ser una constante cuyo valor aumenta cada vez más conforme D_T/D_{act} aumenta. En el régimen en el que $v, \alpha \rightarrow \infty$ manteniendo $D_{\text{act}} = v^2/\alpha = \text{cte}$, se pudo determinar que el perfil se comporta como constante, al ser $P(x)$ una gaussiana; un resultado relevante de esto fue que, al tener que la difusión total es la suma de ambos coeficientes de difusión, es fácil anular el término D_{act} , obteniendo una expresión de la distribución de probabilidad y del perfil $T(x)$ para un ensamble de partículas Brownianas confinadas por un potencial armónico.

4.2. Conclusiones

Este proyecto, además de presentar un análisis sobre un caso complejo de movimiento activo confinado, sigue dejando la oportunidad de poder explorar más allá, sofisticando aún más las variables y condiciones del problema principal; un ejemplo de esto es considerando ahora que $D_T = D_T(x)$ originando un baño térmico inhomogéneo que, con la inclusión de los efectos de la actividad, resulta un perfil efectivo $T(x)$ mayormente inhomogéneo, a diferencia del caso que analizamos donde a pesar de tener un perfil efectivo no homogéneo también, el baño térmico era inhomogéneo solamente por la actividad. Esta nueva consideración provoca que el problema a resolver sea aún más complejo ya que tendríamos difusión no “Fickiana” pero resultaría bastante útil implementarlo en el control de la difusión de partículas activas atrapadas por un potencial armónico. Como lo mencionamos al inicio de este trabajo, los resultados obtenidos de ambos objetivos pueden ser de gran utilidad ya que, a pesar de que aún no se han obtenido resultados experimentales de partículas “run-and-tumble” confinadas por una trampa armónica considerándose los efectos de las fluctuaciones térmicas, diversos experimentos y simulaciones se han desarrollado con bacterias como la *E.coli*, cuya trayectoria está dada por una caminata aleatoria que puede ser descrita por el modelo “run-and-tumble”, donde

CAPÍTULO 4. EPÍLOGO

permanecen confinadas por paredes rígidas o potenciales de atrapamiento y sería interesante que en ellos se considerara la difusión térmica para que así los datos obtenidos sobre la distribución de partículas o la temperatura del medio, puedan contrastarse con lo presentado en este trabajo. Una posible trascendencia de esto puede ser el origen de la manipulación a nivel micro de este tipo de partículas, ya que si se tiene control de la temperatura del medio en el que se encuentran sumergidas y se tiene una trampa armónica, dependiendo de los valores de las variables externas, podemos hacer que las partículas se confinen en cierta región del espacio o se comporten de cierta manera con base a toda la información desarrollada a lo largo de este proyecto de investigación.

Apéndice A

Apéndice

A.1. Deducción de $\hat{P}(k, t)$ para movimiento Browniano confinado por un potencial armónico

Queremos encontrar una solución para la distribución de probabilidad $\hat{P}(k, t)$ de la siguiente ecuación, que corresponde a la expresión (2.44) del Capítulo 2

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{P} = -\mu k \frac{\partial}{\partial k} \hat{P} - Dk^2 \hat{P}. \quad (\text{A.1})$$

Por el método de las características a esta última ecuación la podemos ver de la siguiente manera

$$\frac{d}{dt} \hat{P} = \frac{dk}{dt} \frac{\partial}{\partial k} \hat{P} + \frac{dt}{dt} \frac{\partial}{\partial t} \hat{P} = \frac{dk}{dt} \frac{\partial}{\partial k} \hat{P} + \frac{\partial}{\partial t} \hat{P}; \quad (\text{A.2})$$

recordando que $\tilde{P} = \hat{P}(k, t)$, y considerando que $k = k(t)$, podemos notar que se obtienen las siguientes ecuaciones diferenciales

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{P} &= -Dk^2 \hat{P}, \\ \frac{dk}{dt} &= \mu k, \\ \frac{dt}{dt} &= 1; \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

la última ecuación en (A.3) es trivial y resulta innecesario añadirla, pero se menciona para esclarecer el procedimiento. Se resuelve en primera instancia la segunda ecuación de (A.3) teniendo que

$$\frac{dk}{k} = \mu dt, \quad (\text{A.4})$$

llegando a que

$$\ln k(t) \Big|_0^t = \mu t \Big|_0^t, \quad (\text{A.5})$$

de modo que

$$\ln \left(\frac{k(t)}{k(0)} \right) = \mu t, \quad (\text{A.6})$$

donde

$$k(t) = k(0)e^{\mu t}. \quad (\text{A.7})$$

Ahora, sustituimos (A.5) en la primera ecuación de (A.3)

$$\frac{d}{dt} \hat{P} = -Dk^2 \hat{P} = -D[k(0)]^2 e^{2\mu t} \hat{P}, \quad (\text{A.8})$$

y procedemos a resolverla, obteniendo

$$\ln [\hat{P}(k, t)] \Big|_0^t = -\frac{D[k(0)]^2}{2\mu} e^{2\mu t} \Big|_0^t. \quad (\text{A.9})$$

En esta última ecuación (A.9) hacemos

$$\ln \left(\frac{\hat{P}(k, t)}{\hat{P}(k, 0)} \right) = -\frac{D[k(0)]^2}{2\mu} [e^{2\mu t} - 1] = -\frac{D[k(0)]^2 e^{2\mu t}}{2\mu} [1 - e^{-2\mu t}], \quad (\text{A.10})$$

lo que implica que

$$\hat{P}(k, t) = \hat{P}(k, 0) e^{-\frac{Dk^2}{2\mu} [1 - e^{-2\mu t}]}. \quad (\text{A.11})$$

Se puede observar que al considerar que $k = k(t)$, la condición (2.47) cumple con lo siguiente

$$\hat{P}(k, 0) = \hat{P}(k(0), 0) = \exp[-ik(0)x_0], \quad (\text{A.12})$$

donde al despejar $k(0)$ de la ecuación (A.7), la expresión (A.12) toma la siguiente forma

$$\hat{P}(k(0), 0) = \exp[-ik(0)x_0] = \exp[-ikx_0 e^{-\mu t}]. \quad (\text{A.13})$$

Por tanto, si se sustituye (A.13) en la ecuación (A.11), se obtiene la solución de (A.1)

$$\hat{P}(k, t) = \exp \left[-ikx_0 e^{-\mu t} - \frac{Dk^2}{2\mu} (1 - e^{-2\mu t}) \right], \quad (\text{A.14})$$

que corresponde a la expresión para $\hat{P}(k, t)$ dada en (2.48).

A.1.1. Transformada de Fourier inversa de la solución $\hat{P}(k, t)$

Sabemos que la transformada de Fourier inversa de la distribución de probabilidad $\hat{P}(k, t)$ obtenida en (A.14), se determina de la siguiente manera a partir de (1.19)

$$P(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} \hat{P}(k, t) dk. \quad (\text{A.15})$$

Esto es con el fin de conocer la expresión de dicha distribución en el espacio real ($P(x, t)$). Por ello, en (A.15) sustituimos la expresión obtenida en la sección anterior para $\hat{P}(k, t)$, teniendo que

$$P(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} \exp \left[-ikx_0 e^{-\mu t} - \frac{Dk^2}{2\mu} (1 - e^{-2\mu t}) \right] dk, \quad (\text{A.16})$$

de donde

$$P(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[ik(x - x_0 e^{-\mu t}) - \frac{Dk^2}{2\mu} (1 - e^{-2\mu t}) \right] dk. \quad (\text{A.17})$$

Observamos que si completamos el binomio cuadrado en el argumento de la exponencial, se tiene la siguiente equivalencia

$$\begin{aligned} ik(x - x_0 e^{-\mu t}) - \frac{Dk^2[1 - e^{-2\mu t}]}{2\mu} &= -\frac{\mu(x - x_0 e^{-\mu t})^2}{2D(1 - e^{-2\mu t})} \\ &\quad - \left[\frac{k\sqrt{D(1 - e^{-2\mu t})}}{\sqrt{2\mu}} - i\frac{\sqrt{\mu}(x - x_0 e^{-\mu t})}{\sqrt{2D(1 - e^{-2\mu t})}} \right]^2; \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

por tanto, si sustituimos lo obtenido en (A.18) en el argumento de la exponencial en (A.17) nos resulta que

$$\begin{aligned} P(x, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \exp \left[-\frac{\mu(x - x_0 e^{-\mu t})^2}{2D(1 - e^{-2\mu t})} - \left(\frac{k\sqrt{D(1 - e^{-2\mu t})}}{\sqrt{2\mu}} - i\frac{\sqrt{\mu}[x - x_0 e^{-\mu t}]}{\sqrt{2D(1 - e^{-2\mu t})}} \right)^2 \right] \\ &= \frac{1}{2\pi} \exp \left[-\frac{\mu(x - x_0 e^{-\mu t})^2}{2D(1 - e^{-2\mu t})} \right] \int_{-\infty}^{+\infty} dk \exp \left[-\left(\frac{k\sqrt{D(1 - e^{-2\mu t})}}{\sqrt{2\mu}} - i\frac{\sqrt{\mu}[x - x_0 e^{-\mu t}]}{\sqrt{2D(1 - e^{-2\mu t})}} \right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Si consideramos el siguiente cambio de variable

$$z = \frac{k\sqrt{D(1 - e^{-2\mu t})}}{\sqrt{2\mu}} - i\frac{\sqrt{\mu}(x - x_0 e^{-\mu t})}{\sqrt{2D(1 - e^{-2\mu t})}}, \quad (\text{A.20})$$

entonces

$$dz = \frac{\sqrt{D(1 - e^{-2\mu t})}}{\sqrt{2\mu}} dk, \quad (\text{A.21})$$

de modo que si se sustituye (A.20) y (A.21) en (A.19), se tiene que

$$P(x, t) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\mu}{2D(1 - e^{-2\mu t})}} \exp \left[-\frac{\mu(x - x_0 e^{-\mu t})^2}{2D(1 - e^{-2\mu t})} \right] \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{-z^2}, \quad (\text{A.22})$$

pero recordemos que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{-z^2} = \sqrt{\pi}, \quad (\text{A.23})$$

por tanto, la distribución de probabilidad en el espacio real de encontrar a la partícula Browniana confinada por paredes rígidas en una dimensión, es de la forma

$$P(x, t) = \sqrt{\frac{\mu}{2\pi D(1 - e^{-2\mu t})}} \exp \left[-\frac{\mu(x - x_0 e^{-\mu t})^2}{2D(1 - e^{-2\mu t})} \right], \quad (\text{A.24})$$

que corresponde a la solución dada en (2.49).

A.2. Límite estacionario de $\tilde{P}(x, s)$ para movimiento “run-and-tumble” confinado por paredes rígidas

Procedemos a usar la siguiente propiedad establecida por el segundo Teorema Tauberiano[3]

$$\lim_{s \rightarrow 0} s \tilde{P}(x, s) = \lim_{t \rightarrow \infty} P(x, t), \quad (\text{A.25})$$

con el fin de conocer una expresión de dicha distribución de probabilidad en el régimen estacionario. Multiplicando por s (considerando s sumamente pequeño) la expresión (2.92), se tiene por un lado para el término $\tilde{W}(s)$ que

$$s \tilde{W}(s) = \frac{s}{(s + vc)e^{c\frac{L}{2}} - (vc - s)e^{-c\frac{L}{2}}} = \frac{1}{\left(1 + \frac{vc}{s}\right)e^{c\frac{L}{2}} - \left(\frac{vc}{s} - 1\right)e^{-c\frac{L}{2}}}, \quad (\text{A.26})$$

donde al sustituir la expresión (2.76) llegamos a que

$$\frac{1}{\left(1 + \frac{vc}{s}\right)e^{c\frac{L}{2}} - \left(\frac{vc}{s} - 1\right)e^{-c\frac{L}{2}}} = \frac{1}{\left(1 + \frac{\sqrt{s(s+\alpha)}}{s}\right) e^{\frac{\sqrt{s(s+\alpha)}}{v} \frac{L}{2}} - \left(\frac{\sqrt{s(s+\alpha)}}{s} - 1\right) e^{-\frac{\sqrt{s(s+\alpha)}}{v} \frac{L}{2}}}; \quad (\text{A.27})$$

A.3. LÍMITE EFECTIVO DE $P(X)$ PARA MOVIMIENTO “RUN-AND-TUMBLE”
CONFINADO POR UN POTENCIAL ARMÓNICO

al considerar s sumamente pequeño, hacemos una expansión en serie de Taylor a primer orden de las exponenciales, teniendo que

$$\begin{aligned} &\approx \frac{1}{\left(1 + \frac{\sqrt{s(s+\alpha)}}{s}\right) \left(1 + \frac{L\sqrt{s(s+\alpha)}}{2v}\right) - \left(\frac{\sqrt{s(s+\alpha)}}{s} - 1\right) \left(1 - \frac{L\sqrt{s(s+\alpha)}}{2v}\right)} \\ &= \frac{1}{1 + \frac{L\sqrt{s(s+\alpha)}}{2v} + \frac{\sqrt{s(s+\alpha)}}{s} + \frac{L(s+\alpha)}{2v} - \frac{\sqrt{s(s+\alpha)}}{s} + \frac{L(s+\alpha)}{2v} + 1 - \frac{L\sqrt{s(s+\alpha)}}{2v}} = \frac{1}{2 + \frac{L(s+\alpha)}{v}}; \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

entonces, si aplicamos el límite (A.25) en (A.28), obtenemos

$$\lim_{s \rightarrow 0} \frac{1}{2 + \frac{L(s+\alpha)}{v}} = \frac{1}{2 + \frac{L\alpha}{v}}. \quad (\text{A.29})$$

Por otro lado, para el factor restante de \tilde{P} sustituimos (2.76)

$$\begin{aligned} &\frac{(vc + s + \alpha)e^{c(\frac{L}{2}-|x|)} - (vc - s - \alpha)e^{-c(\frac{L}{2}-|x|)}}{2v} \\ &= \frac{(\sqrt{s(s+\alpha)} + s + \alpha)e^{\frac{\sqrt{s(s+\alpha)}}{v}(\frac{L}{2}-|x|)} - (\sqrt{s(s+\alpha)} - s - \alpha)e^{-\frac{\sqrt{s(s+\alpha)}}{v}(\frac{L}{2}-|x|)}}{2v} \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

y aplicamos el límite (A.25) en (A.30)

$$\lim_{s \rightarrow 0} \frac{(\sqrt{s(s+\alpha)} + s + \alpha)e^{\frac{\sqrt{s(s+\alpha)}}{v}(\frac{L}{2}-|x|)} - (\sqrt{s(s+\alpha)} - s - \alpha)e^{-\frac{\sqrt{s(s+\alpha)}}{v}(\frac{L}{2}-|x|)}}{2v} = \frac{\alpha}{v}, \quad (\text{A.31})$$

por lo que la expresión para la distribución de probabilidad en el régimen estacionario es

$$P(x) = \frac{\alpha}{2v} \left(\frac{1}{1 + \frac{\alpha L}{2v}} \right). \quad (\text{A.32})$$

A.3. Límite efectivo de $P(x)$ para movimiento “run-and-tumble” confinado por un potencial armónico

Por demostrar que

$$\lim_{v, \alpha \rightarrow \infty} P_{act}(x) = \frac{2}{4^{\frac{\alpha}{2}} B(\frac{\alpha}{2}; \frac{\alpha}{2})} \frac{\gamma}{v} \left(1 - \left(\frac{\gamma x}{v} \right)^2 \right)^{\frac{\alpha}{2}-1} = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi D_{act}}} e^{-\frac{\gamma x^2}{2D_{act}}}, \quad (\text{A.33})$$

manteniendo

$$D_{act} = v^2/\alpha = cte. \quad (\text{A.34})$$

Observamos primero lo siguiente

$$\frac{2}{4^{\frac{\bar{\alpha}}{2}} B\left(\frac{\bar{\alpha}}{2}; \frac{\bar{\alpha}}{2}\right)} \frac{\gamma}{v} \left(1 - \left(\frac{\gamma x}{v}\right)^2\right)^{\frac{\bar{\alpha}}{2}-1} = \frac{1}{2 \cdot 4^{\frac{\bar{\alpha}}{2}-1} B\left(\frac{\bar{\alpha}}{2}; \frac{\bar{\alpha}}{2}\right)} \frac{\gamma}{v} \left(1 - \left(\frac{\gamma x}{v}\right)^2\right)^{\frac{\bar{\alpha}}{2}-1} \quad (\text{A.35})$$

y procedemos a aplicar (A.34) en esta última expresión, obteniendo

$$\frac{1}{2 \cdot 4^{\frac{\bar{\alpha}}{2}-1} B\left(\frac{\bar{\alpha}}{2}; \frac{\bar{\alpha}}{2}\right) \cdot \bar{\alpha}^{\frac{1}{2}}} \sqrt{\frac{\gamma}{D_{\text{act}}}} \left(1 - \frac{\gamma x^2}{\bar{\alpha} D_{\text{act}}}\right)^{\frac{\bar{\alpha}}{2}-1}. \quad (\text{A.36})$$

Por un lado hacemos lo siguiente expandiendo el binomio de (A.36)

$$\left(1 - \frac{\gamma x^2}{\bar{\alpha} D_{\text{act}}}\right)^{\frac{\bar{\alpha}}{2}-1} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{\bar{\alpha}}{2}-1\right)!}{k! \left(\frac{\bar{\alpha}}{2}-1-k\right)!} \left(-\frac{\gamma x^2}{\bar{\alpha} D_{\text{act}}}\right)^k \quad (\text{A.37})$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{\bar{\alpha}}{2}-1\right) \left(\frac{\bar{\alpha}}{2}-2\right) \cdots \left(\frac{\bar{\alpha}}{2}-k\right) \left(\frac{\bar{\alpha}}{2}-k-1\right)!}{k! \left(\frac{\bar{\alpha}}{2}-k-1\right)!} \left(-\frac{\gamma x^2}{\bar{\alpha} D_{\text{act}}}\right)^k \quad (\text{A.38})$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{\bar{\alpha}}{2}-1\right) \left(\frac{\bar{\alpha}}{2}-2\right) \cdots \left(\frac{\bar{\alpha}}{2}-k\right)}{k!} \left(-\frac{\gamma x^2}{\bar{\alpha} D_{\text{act}}}\right)^k \quad (\text{A.39})$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{\bar{\alpha}}{2}\right)^k + a_1 \left(\frac{\bar{\alpha}}{2}\right)^{k-1} + a_2 \left(\frac{\bar{\alpha}}{2}\right)^{k-2} \cdots + a_k \left(\frac{\bar{\alpha}}{2}\right)^0}{k!} \left(-\frac{\gamma x^2}{\bar{\alpha} D_{\text{act}}}\right)^k, \quad (\text{A.40})$$

siendo a_k coeficientes originados por el producto involucrado en (A.39). Posteriormente desarrollamos (A.40) de la siguiente manera

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\left(\frac{\bar{\alpha}}{2}\right)^k}{\left(\frac{\bar{\alpha}}{2}\right)^k} + \frac{a_1 \left(\frac{\bar{\alpha}}{2}\right)^{k-1}}{\left(\frac{\bar{\alpha}}{2}\right)^k} \cdots + \frac{a_k}{\left(\frac{\bar{\alpha}}{2}\right)^k} \right) \frac{1}{k!} \left(-\frac{\gamma x^2}{2D_{\text{act}}}\right)^k; \quad (\text{A.41})$$

si aplicamos el límite en el que $v, \alpha \rightarrow \infty$,

$$\lim_{v, \alpha \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^{\infty} \left(1 + a_1 \left(\frac{\bar{\alpha}}{2}\right)^{-1} \cdots + a_k \left(\frac{\bar{\alpha}}{2}\right)^{-k}\right) \frac{1}{k!} \left(-\frac{\gamma x^2}{2D_{\text{act}}}\right)^k \quad (\text{A.42})$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(-\frac{\gamma x^2}{2D_{\text{act}}}\right)^k = e^{-\frac{\gamma x^2}{2D_{\text{act}}}}. \quad (\text{A.43})$$

Por otro lado, desarrollamos el coeficiente

$$\frac{1}{2 \cdot 4^{\frac{\bar{\alpha}}{2}-1} B\left(\frac{\bar{\alpha}}{2}; \frac{\bar{\alpha}}{2}\right) \cdot \bar{\alpha}^{\frac{1}{2}}}; \quad (\text{A.44})$$

A.3. LÍMITE EFECTIVO DE $P(X)$ PARA MOVIMIENTO “RUN-AND-TUMBLE”
CONFINADO POR UN POTENCIAL ARMÓNICO

utilizando la siguiente propiedad para la función $B(\frac{\bar{\alpha}}{2}; \frac{\bar{\alpha}}{2})$

$$B\left(\frac{\bar{\alpha}}{2}; \frac{\bar{\alpha}}{2}\right) = \frac{\Gamma\left(\frac{\bar{\alpha}}{2}\right)\Gamma\left(\frac{\bar{\alpha}}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\bar{\alpha}}{2} + \frac{\bar{\alpha}}{2}\right)}, \quad (\text{A.45})$$

tenemos que la expresión (A.44) toma la forma

$$\frac{\Gamma(\bar{\alpha})}{2 \cdot 4^{\frac{\bar{\alpha}}{2}-1} \bar{\alpha}^{\frac{1}{2}} \Gamma\left(\frac{\bar{\alpha}}{2}\right)\Gamma\left(\frac{\bar{\alpha}}{2}\right)}. \quad (\text{A.46})$$

Consideramos ahora una propiedad de la función $\Gamma(x)$ dada por

$$\Gamma(2x) = \frac{2^{2x-1}}{\sqrt{\pi}} \Gamma(x)\Gamma\left(x + \frac{1}{2}\right), \quad (\text{A.47})$$

donde al tomar $2x = \bar{\alpha}$, esta propiedad se ve como

$$\Gamma(\bar{\alpha}) = \frac{2^{\bar{\alpha}-1}}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{\bar{\alpha}}{2}\right)\Gamma\left(\frac{\bar{\alpha}}{2} + \frac{1}{2}\right). \quad (\text{A.48})$$

Aplicando (A.48) a la expresión (A.46), se tiene que

$$\frac{2^{\bar{\alpha}-1} \Gamma\left(\frac{\bar{\alpha}}{2}\right)\Gamma\left(\frac{\bar{\alpha}}{2} + \frac{1}{2}\right)}{2 \cdot 4^{\frac{\bar{\alpha}}{2}-1} \bar{\alpha}^{\frac{1}{2}} \sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{\bar{\alpha}}{2}\right)\Gamma\left(\frac{\bar{\alpha}}{2}\right)} = \frac{4^{\frac{\bar{\alpha}}{2}-\frac{1}{2}} \Gamma\left(\frac{\bar{\alpha}}{2} + \frac{1}{2}\right)}{4^{\frac{1}{2}} 4^{\frac{\bar{\alpha}}{2}-1} \bar{\alpha}^{\frac{1}{2}} \sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{\bar{\alpha}}{2}\right)} = \frac{\Gamma\left(\frac{\bar{\alpha}}{2} + \frac{1}{2}\right)}{\bar{\alpha}^{\frac{1}{2}} \sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{\bar{\alpha}}{2}\right)}; \quad (\text{A.49})$$

si aplicamos el límite en el que $v, \alpha \rightarrow \infty$, tenemos que

$$\lim_{v, \alpha \rightarrow \infty} \frac{\Gamma\left(\frac{\bar{\alpha}}{2} + \frac{1}{2}\right)}{\bar{\alpha}^{\frac{1}{2}} \sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{\bar{\alpha}}{2}\right)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}, \quad (\text{A.50})$$

debido a la propiedad

$$\lim_{p \rightarrow \infty} \frac{\Gamma\left(p + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma(p)} = \sqrt{p}, \quad (\text{A.51})$$

siendo en este caso $p = \frac{\bar{\alpha}}{2}$. Por tanto, tenemos que efectivamente

$$\lim_{v, \alpha \rightarrow \infty} \frac{2}{4^{\frac{\bar{\alpha}}{2}} B\left(\frac{\bar{\alpha}}{2}; \frac{\bar{\alpha}}{2}\right)} \frac{\gamma}{v} \left(1 - \left(\frac{\gamma x}{v}\right)^2\right)^{\frac{\bar{\alpha}}{2}-1} = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi D_{\text{act}}}} e^{-\frac{\gamma x^2}{2D_{\text{act}}}}. \quad (\text{A.52})$$

A.4. Solución del perfil de temperatura efectivo $T(x)$

La forma general de la ecuación (3.91), que es una ecuación diferencial de primer orden, es

$$a_0(x) \frac{dy}{dx} + a_1(x)y = g(x), \quad (\text{A.53})$$

donde si $a_0(x) \neq 0$, podemos hacer

$$\frac{dy}{dx} + \frac{a_1(x)}{a_0(x)}y = \frac{g(x)}{a_0(x)}. \quad (\text{A.54})$$

Posteriormente definimos las siguientes funciones

$$h(x) = \frac{a_1(x)}{a_0(x)}, \quad (\text{A.55})$$

$$f(x) = \frac{g(x)}{a_0(x)}, \quad (\text{A.56})$$

teniendo que

$$\frac{dy}{dx} + h(x)y = f(x). \quad (\text{A.57})$$

Ahora, calculamos un factor integrante $\mu(x)$ definido como

$$\mu(x) = e^{\int h(x)dx}, \quad (\text{A.58})$$

el cual se multiplica por la ecuación (A.57), teniendo que

$$\mu(x)(y'(x) + h(x)y(x)) = \mu(x)f(x). \quad (\text{A.59})$$

Observamos que

$$(\mu y)' = \mu(y' + h(x)y) \quad (\text{A.60})$$

debido a la definición de $\mu(x)$, de modo que al sustituir esto en (A.59), llegamos a que

$$(\mu(x)y(x))' = \mu(x)f(x) \quad (\text{A.61})$$

donde integrando se tiene que

$$y(x) = \frac{1}{\mu(x)} \left(\int \mu(x)f(x)dx + C \right). \quad (\text{A.62})$$

Analizando la ecuación (3.91), podemos decir que

$$h(x) = \frac{d}{dx} \log(P(x)), \quad (\text{A.63})$$

$$f(x) = -\frac{mw^2x}{k_B}, \quad (\text{A.64})$$

A.4. SOLUCIÓN DEL PERFIL DE TEMPERATURA EFECTIVO $T(X)$

teniendo que

$$\mu(x) = e^{\int h(x)dx} = e^{\int \frac{d}{dx} \log(P(x))dx} = P(x), \quad (\text{A.65})$$

de modo que la solución general para $T(x)$ está dada por (3.92).

Bibliografía

- [1] J. Tailleur A. P. Solon, N. E. Cates. Active brownian particles and run-and-tumble particles: a comparative study. *Univ Paris Diderot, Sorbonne Paris*, (7057), 2015.
- [2] Luca Angelani. Confined run-and-tumble swimmers in one dimension. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 50(32):325–601, 2017.
- [3] George B Arfken and Hans J Weber. *Mathematical methods for physicists*, 1999.
- [4] J Ricardo Arias-González. Termodinámica de no-equilibrio en sistemas pequeños. *Instituto Madrileño de Estudios Avanzados en Nanociencia (IMDEA Nanociencia), y Centro Nacional de Biotecnología, CSIC*, 1:28–49.
- [5] Jean Baptiste Joseph baron de Fourier. *Théorie analytique de la chaleur*. Firmin Didot, 1822.
- [6] William Bown. Science: Brownian motion sparks renewed debate. *Magazine issue*, 1808, 1992.
- [7] Liphardt J. Bustamante, C. and F. Ritort. The nonequilibrium thermodynamics of small systems. *Physics Today*, 58:43–48, 2005.
- [8] Ovidiu Calin. *An informal introduction to stochastic calculus with applications*. World Scientific, 2015.
- [9] Horatio Scott Carslaw and John Conrad Jaeger. *Conduction of heat in solids*. Number BOOK. Clarendon press, 1992.
- [10] Gustavsson K. Mehlig B. Cichos, F. *Machine learning for active matter*. *Nat Mach Intell* 2, 2020.
- [11] John Crank. *The mathematics of diffusion*. Oxford university press, 1979.
- [12] Abhishek Dhar, Anupam Kundu, Satya N Majumdar, Sanjib Sabhapandit, and Grégory Schehr. Run-and-tumble particle in one-dimensional confining potentials: Steady-state, relaxation, and first-passage properties. *Physical Review E*, 99(3):032–132, 2019.

BIBLIOGRAFÍA

- [13] Ritort F. Nonequilibrium fluctuations in small systems: From physics to biology. *Advances in Chemical Physics*, 137:31–123, 2007.
- [14] Alessandro Fiasconaro, Werner Ebeling, and Ewa Gudowska-Nowak. Active brownian motion models and applications to ratchets. *The European Physical Journal B*, 65(3):403–414, 2008.
- [15] David J. Fisher. *Self-Propelled Janus Particles*, volume 93. Materials Research Forum LLC, 2020.
- [16] E. Rodriguez G. Young. Einstein on brownian motion. *American Institute of Physics*, 2011.
- [17] Jinglei Hu, Adam Wysocki, Roland G Winkler, and Gerhard Gompper. Physical sensing of surface properties by microswimmers—directing bacterial motion via wall slip. *Scientific reports*, 5(1):1–7, 2015.
- [18] Leo P Kadanoff. *Statistical physics: statics, dynamics and renormalization*. World Scientific Publishing Company, 2000.
- [19] S. S. Ioannis Karatzas. Brownian motion and stochastic calculus. *The address: Springer-Verlag New York*, 2, 1998.
- [20] Morris Kline. *Mathematical Thought from Ancient to Modern Times: Volume 2*, volume 2. Oxford university press, 1990.
- [21] P. Langevin. *On the Theory of Brownian Motion*, volume 146. 1908.
- [22] Eric Lauga. *The Fluid Dynamics of Cell Motility*, volume 62. Cambridge University Press, 2020.
- [23] Simon; Medellin David; Raizen Mark Li, Tongcang; Kheifets. *Measurement of the instantaneous velocity of a Brownian particle*. Number 5986. *Science* 328, 2010.
- [24] Fuduo Ma, Xingfu Yang, Hui Zhao, and Ning Wu. Inducing propulsion of colloidal dimers by breaking the symmetry in electrohydrodynamic flow. *Physical review letters*, 115(20):208–302, 2015.
- [25] Kanaya Malakar, V Jemseena, Anupam Kundu, K Vijay Kumar, Sanjib Sabhapandit, Satya N Majumdar, S Redner, and Abhishek Dhar. Steady state, relaxation and first-passage properties of a run-and-tumble particle in one-dimension. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2018(4):043–215, 2018.
- [26] Peter Mörters and Yuval Peres. *Brownian motion*, volume 30. Cambridge University Press, 2010.
- [27] W. Ebeling B. Lindner P. Romanczuk, M. Bar and L. Schimansky-Geier. *Active Brownian Particles: From Individual to Collective Stochastic Dynamics*, volume 202. 2012.

-
- [28] AE Patteson, Arvind Gopinath, M Goulian, and PE Arratia. Running and tumbling with e. coli in polymeric solutions. *Scientific reports*, 5(1):1–11, 2015.
- [29] Walter F Paxton, Kevin C Kistler, Christine C Olmeda, Ayusman Sen, Sarah K St. Angelo, Yanyan Cao, Thomas E Mallouk, Paul E Lammert, and Vincent H Crespi. Catalytic nanomotors: autonomous movement of striped nanorods. *Journal of the American Chemical Society*, 126(41):13424–13431, 2004.
- [30] Matteo Polettini. Diffusion in nonuniform temperature and its geometric analog. *Physical Review E*, 87(3):032–126, 2013.
- [31] S. Ramaswamy. The mechanics and statistics of active matter. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 1(1):323–345, 2010.
- [32] F Reif. *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*. New York, 1965.
- [33] Hannes Risken and JH Eberly. The fokker-planck equation, methods of solution and applications. *Journal of the Optical Society of America B Optical Physics*, 2(3):508, 1985.
- [34] James Sethna. *Statistical mechanics: entropy, order parameters, and complexity*, volume 14. Oxford University Press, USA, 2021.
- [35] Francisco J Sevilla, Alejandro V Arzola, and Enrique Puga Cital. Stationary superstatistics distributions of trapped run-and-tumble particles. *Physical Review E*, 99(1):012–145, 2019.
- [36] Abhinav Sharma and Joseph M Brader. Brownian systems with spatially inhomogeneous activity. *Physical review E*, 96(3):032–604, 2017.
- [37] E. Ben-Jacob I. Cohen T. Vicsek, A. Czirok and O. Shochet. *Novel type of phase transition in a system of self-driven particles*, volume 75. 1995.
- [38] Borge ten Hagen, Sven van Teeffelen, and Hartmut Löwen. Brownian motion of a self-propelled particle. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 23(19):119–194, 2011.
- [39] NG Van Kampen. Diffusion in inhomogeneous media. *Journal of physics and chemistry of solids*, 49(6):673–677, 1988.
- [40] Nobuhiko Watari and Ronald G Larson. The hydrodynamics of a run-and-tumble bacterium propelled by polymorphic helical flagella. *Biophysical journal*, 98(1):12–17, 2010.