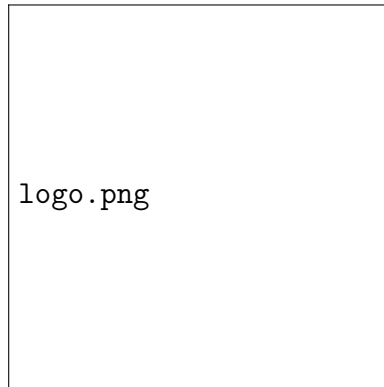


UNIVERSIDAD NACIONAL DE INGENIERÍA

FACULTAD DE CIENCIAS



ECUACIÓN DE LANGEVIN Y  
MOVIMIENTO BROWNIANO

ELABORADO POR  
Chaico Cahuana, Angel Tomas

ASESOR  
Hector Raul Loro Ramirez

LIMA-PERÚ

6 de septiembre de 2021

# Índice general

|   |           |
|---|-----------|
| <b>Índice de figuras</b>  | <b>2</b>  |
| I. Introducción: . . . . .  | 1         |
| II. Antecedentes: . . . . .   | 2         |
| 1. Robert Brown 1827. . . . .   | 2         |
| 2. Solución del movimiento browniano. . . . .                             | 2         |
| 3. Ratchet de Feynman 1962. . . . .                                       | 5         |
| III. Fundamento teórico. . . . .  | 7         |
| 1. Proceso estocástico. . . . .   | 7         |
| 2. Procesos de Markov. . . . .  | 8         |
| 3. Ecuación de Chapman-Kolmogorov. . . . .                                | 8         |
| 4. Ecuación de Langevin. . . . .  | 9         |
| 5. Ecuación de Fokker-Planck. . . . .                                     | 13        |
| 6. Soluciones estacionarias. . . . .                                      | 16        |
| 7. Soluciones no estacionarias: Proceso Wiener . . . . .                  | 18        |
| 8. Algoritmo para resolver ecuaciones diferenciales estocásticas. . . . . | 19        |
| IV. Modelo simplificado estocástico. . . . .                              | 22        |
| V. Resultados. . . . .  | 24        |
| 1. Simulación del proceso Wiener. . . . .                                 | 24        |
| 2. Características del potencial ratchet. . . . .                         | 26        |
| 3. Simulación para diferentes coeficientes de difusión $D$ . . . . .      | 28        |
| 4. Velocidad media con el potencial ratchet. . . . .                      | 30        |
| 5. Encendido y apagado del potencial ratchet. . . . .                     | 31        |
| 6. Corriente de partículas para diferentes fuerzas. . . . .               | 36        |
| VI. Futuros trabajos. . . . .   | 37        |
| 1. Motores moleculares. . . . .   | 37        |
| VII. Conclusiones. . . . .  | 41        |
| <b>Bibliografía</b>   | <b>42</b> |

# Índice de figuras

|     |  |    |
|-----|--|----|
| 1.  | Ratchet de Feynman. . . . .  | 6  |
| 2.  | Forma de las fuerzas estocásticas. . . . .   | 9  |
| 3.  | Correlación de la fuerza estocástica. . . . .  | 10 |
| 4.  | Densidad de probabilidad en el proceso Wiener . . . . .  | 19 |
| 5.  | Posición promedio del proceso Wiener. . . . .  | 24 |
| 6.  | Posición cuadrática media del proceso Wiener. . . . .  | 25 |
| 7.  | Velocidad media en el proceso Wiener. . . . .  | 25 |
| 8.  | Posición de 3 partículas en el proceso Wiener. . . . .   | 26 |
| 9.  | Potencial ratchet del modelo simplificado. . . . .   | 27 |
| 10. | Potencial ratchet mas una fuerza constante. . . . .  | 27 |
| 11. | Fuerza debido al potencial ratchet. . . . .  | 28 |
| 12. | Simulación para $D = 1$ . . . . .  | 29 |
| 13. | Simulación para $D = 0,1$ . . . . .  | 29 |
| 14. | Simulación para $D = 0,01$ . . . . .   | 30 |
| 15. | Velocidad promedio con un potencial ratchet. . . . .   | 30 |
| 16. | Velocidad media versus fuerza. . . . .   | 31 |
| 17. | Periodo de apagado y encendido del ratchet prolongado. . . . .   | 32 |
| 18. | Comportamiento de 10 partículas cuando el ratchet se enciende y apaga en un periodo temporal de 5. . . . . | 33 |
| 19. | Desplazamiento neto de partículas. . . . .   | 34 |
| 20. | Distribución de probabilidad en el apagado del potencial ratchet. . . . .                                  | 35 |
| 21. | Regresión sobre la posición media. . . . .   | 35 |
| 22. | Fuerza versus velocidad media en el efecto ratchet. . . . .  | 36 |
| 23. | Tipos de motores moleculares. . . . .  | 37 |
| 24. | Estructura de un Kinesin. . . . .  | 38 |
| 25. | Mecanismo de transporte del Kinesin. . . . .   | 38 |
| 26. | Potencial modelo para el movimiento del Kinesin. . . . .   | 39 |
| 27. | Modelo para el Kinesin. . . . .  | 40 |

## **Resumen**

Se estudia el movimiento browniano mediante la ecuación de Langevin y la ecuación de Fokker-Planck deducida a partir de la ecuación de Chapman-Kolmogorov. Se presenta un algoritmo para resolver ecuaciones diferenciales estocásticas para luego aplicarlo sobre la ecuación de Langevin. El proceso Wiener es simulado para 1000 partículas donde los resultados están de acuerdo con los obtenidos por Einstein y Langevin al estudiar el movimiento browniano, luego se simula al aplicar un potencial ratchet a 100 partículas. El comportamiento de 4 partículas brownianas en presencia de un potencial ratchet es simulada para 3 diferentes coeficientes de difusión 1; 0,1; 0,01, luego se enciende y apaga el potencial ratchet obteniendo así una corriente neta de partículas denominado efecto ratchet. Finalmente el efecto ratchet es extrapolado para explicar aproximadamente el funcionamiento de los motores moleculares.

## I. Introducción:

Al estudiar los fenómenos de la naturaleza los físicos plantean ecuaciones diferenciales que tratan de resolver. Para encontrar las soluciones se deben conocer las condiciones de contorno o iniciales del problema. El detalle aquí es que tratan de encontrar soluciones exactas, sin embargo con el estudio de fenómenos estocásticos, donde reina la aleatoriedad, uno no trata de buscar la solución exacta sino la solución más probable, obteniendo así resultados en terminos estadísticos.

En escala macroscópica las perturbaciones no toman mucho protagonismo como por ejemplo en la medición de corriente [7], sin embargo en escala microscópica dichas perturbaciones toman mayor relevancia como es el caso un grano de polen suspendido en el aire o agua, dando así comienzo al estudio del movimiento browniano por los científicos Robert Brown, Einstein, Langevin, Wiener entre otros [5]. Al tratar de millones de partículas con millones de colisiones entre ellas, el estudio pasa a ser inevitablemente estadístico, donde la teoría de la *Mecánica Estadística* cumple un rol principal. La mecánica estadística ayuda a plantear los postulados básicos de la termodinámica y con ello las aparentes paradojas nacen. Los científicos como Maxwell, Smoluchoski, Feynman [6], [2] entre otros plantean y buscan solución de las paradojas [13], el objetivo de sus paradojas es encontrar fallas en las leyes de la termodinámica como por ejemplo obtener energía de la nada, violando así la segunda ley de la termodinámica. Como resultado se comienza el estudio de la teoría de la información[13] y el de los motores brownianos [6].

El eje principal del estudio de los procesos estocásticos son las ecuaciones diferenciales estocásticas [5], [7], donde lo nuevo es la aparición de variables aleatorias dentro de la ecuación. El estudio en este informe comenzará por entender como es que una variable estocástica(aleatoria) afecta una ecuación diferencial de segundo orden como es en el caso del movimiento browniano [8], [14]. Para un primer tratamiento se estudia y simula un caso simple de la ecuación de Langevin para diferentes circunstancias(variando el coeficiente de difusión, aplicando un potencial ratchet) y corroborar así las suposiciones realizadas previamente por Einstein y Langevin al estudiar el movimiento browniano y presentar el fenómeno ratchet, además se analiza la ecuación de Fokker Planck para estudiar analíticamente los casos simples tratados en la ecuación de Langevin.

El resultado muy importante que se quiere lograr es reproducir el efecto ratchet [12], [1], [10], fenómeno muy estudiado y aplicado en la biología para estudiar los motores proteicos [11]. Este resultado será motivo para una posible investigación más profunda ya sea en la teoría misma(cálculo de Ito [7] y soluciones de la ecuación de Langevin [5]) como en simulaciones más sofisticadas([7], [5]) y por supuesto en el un estudio de la Biofísica.

## II. Antecedentes:

### 1. Robert Brown 1827.

En 1827 el botánico Robert Brown realizando un estudio sobre la vida de las plantas en los mares del sur se percató que los granos de polen suspendidos en diferentes medios acuosos presentaban un movimiento rápido oscilatorio. Brown al principio creía que se trataba de algún movimiento vital<sup>1</sup> sin embargo mediante más experimentos abandono dicha teoría [5].

Antes que las explicaciones dadas por Einstein y Langevin fueran presentadas, se había estudiado en gran medida este fenómeno. Las primeras conclusiones dadas por Gouy fueron: el movimiento es irregular y que aparentemente el camino tomado por las partículas no tiene tangente, los movimientos de cada partícula es independiente, el movimiento se relaciona con la temperatura, masa, viscosidad y además el movimiento nunca cesa. El primer investigador quien estuvo cerca de expresar la noción moderna del movimiento browniano fue C. Wiener en 1863, además fue quien demostró que el camino tomado por las partículas brownianas es continua, pero no diferenciable(caso ideal del movimiento browniano) [5].

Una característica importante como resultado de los estudios de demás investigaciones es que la ley de la equipartición solo se cumple cuando el tiempo entre observaciones es del orden del tiempo entre colisiones, además de que el desplazamiento cuadrático medio es proporcional a la raíz cuadrada del tiempo entre dos observaciones realizadas [5].

### 2. Solución del movimiento browniano.

Fue con Einstein, Langevin y Smoluchoski quienes mostraron soluciones al problema del movimiento browniano, fue entonces cuando empezaban a salir a la luz resultados teóricos al respecto. El recién nacimiento de la Física Estadística estaba dando sus primeros resultados.

### Eisntein 1905.

La explicación de Einstein del movimiento browniano es un buen inicio para estudiar los modelos estocásticos en la naturaleza, ya que contiene muchos conceptos básicos que subyacen en dichos procesos. Veamos de manera concisa las ideas claras y elegantes que utilizo al estudiar el movimiento browniano [7].

Para solucionar el problema Einstein supuso que el movimiento es causado por los frecuentes impactos de las moléculas del líquido sobre el grano de polen. Este movimiento es muy complicado de describir por lo cual solo era posible describirlo probabilístamente<sup>2</sup>.

Todo movimiento es considerado independiente en un intervalo lo suficientemente pequeño  $\tau$ , es decir, en dos sucesivos intervalos de tiempo  $\tau$  la partícula realiza un movimiento totalmente independiente en cada intervalo.

---

<sup>1</sup>En el sentido de que no son debidos a causas físicas.

<sup>2</sup>Los impactos son estadísticamente independientes.

Consideremos un recipiente con un total de  $n$  partículas suspendidas en un líquido (por ejemplo, granos de sal en un tubo de agua). En un intervalo  $\tau$  las partículas suspendidas tendrán un desplazamiento  $\Delta$  (diferente para cada una), que sigue cierta ley de frecuencia  $\phi(\Delta)$ . Sea  $dn$  el número de partículas que experimentan un desplazamiento el cual está entre  $\Delta$  y  $\Delta + d\Delta$  entonces podemos plantear la siguiente ecuación

$$dn = n\phi(\Delta)d\Delta$$

donde:  $\int_{-\infty}^{\infty} \phi(\Delta)d\Delta, \quad \phi(\Delta) = \phi(-\Delta)$

la aparición de  $\phi$ , que rige la ley de frecuencia de los  $\Delta$  no es más que una distribución de probabilidad.

Considerando que la densidad de partículas solo dependan de la coordenada  $x$ , se puede decir que la sección transversal es muy angosta de modo que la densidad varía muy poco sobre dicha sección. Sea  $f(x, t)$  el número de partículas por unidad de volumen. Si en el tiempo  $t$  se tiene una determinada distribución de las partículas en la posición  $x$ , en el tiempo  $t + \tau$  se obtendrá

$$f(x, t + \tau)dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(x + \Delta, t)\phi(\Delta)d\Delta dx \quad (1)$$

Con lo cual obtenemos la siguiente igualdad

$$f(x, t + \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t + \Delta, t)\phi(\Delta)d\Delta \quad (2)$$

Si consideramos  $\tau$  muy pequeño con lo cual los desplazamientos posibles  $\Delta$  serán también pequeños, se puede realizar una expansión en serie de cada una

$$f(x, t + \tau) \approx f(x, t) + \tau \frac{\partial f}{\partial t}$$

$$f(x + \Delta, t) \approx f(x, t) + \Delta \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\Delta^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$$

Tomando asta el primer orden en  $\tau$  y hasta el segundo orden sobre  $\Delta$ , se reemplaza en la ecuación (2). Teniendo en cuenta las propiedades de  $\phi$  se obtiene la ecuación de difusión

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad (3)$$

donde

$$D = \frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Delta^2}{2} \phi(\Delta)d\Delta$$

cuya solución es [4]

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

Con este resultado Einstein obtiene la desviación estándar de la posición

$$\sqrt{\langle x^2 \rangle} = \sqrt{2Dt} \quad (5)$$

este resultado fue deducido por Langevin y también con el estudio de la ecuación de Fokker-Planck para este fenómeno.

Einstein supuso que las colisiones ocurren en intervalos de  $\tau$ , que es tan pequeño que  $t$  es considerado continuo. Aunque esta última suspensión podría ser cuestión de debate, la descripción contiene conceptos que han sido desarrollados últimamente de manera rigurosa y que son parte esencial de los procesos estocásticos. La ecuación (1) hace referencia a la ecuación de *Chapman-Kolmogorov*, la ecuación (3) es un caso especial de la *ecuación de Fokker-Planck* y por último, la *Kramers-Moyal* y similares expansiones son esencialmente el mismo procedimiento realizado por Einstein de ir de la ecuación (1) a (3), siendo esta última (reemplazar un proceso discreto  $\tau$  por un continuo  $t$ ) un tema de discusión en las últimas décadas.

### Langevin 1906.

La deducción de Langevin es más directa, al igual que Einstein la deducción de Langevin también contiene conceptos básicos de los procesos estocásticos de manera más implícita en sus procedimientos. Veamos de manera rápida la deducción hecha por Langevin [7].

Langevin asume que el polen de masa  $m$  es sometido por dos fuerzas. La primera es debido a la viscosidad y está dada por la fórmula planteada para una partícula macroscópica (algo que se podría poner a discusión)  $-6\pi\eta av$ , donde  $\eta$  es la viscosidad y  $a$  el diámetro de la partícula (asumido esférico). La segunda fuerza es debido a las colisiones que denotaremos con  $X$ . Con todo lo mencionado se plantea la ecuación de acuerdo con la leyes de Newton

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = \underbrace{-6\pi\eta a \frac{dx}{dt}}_{\text{viscosidad}} + \underbrace{X}_{\text{colisiones}} \quad (6)$$

Es muy bien conocido de la mecánica estadística que en el estado de equilibrio la energía cinética media es dada por  $\langle E_k \rangle = kT/2$  por lo tanto  $2kT = \langle mv^2 \rangle$ , donde  $T$  es la temperatura y  $k$  la constante de Boltzmann.

En la ecuación (6) se multiplica por  $x$  y realizando algunas manipulaciones se obtiene

$$\frac{m}{2} \frac{d^2(x^2)}{dt^2} - mv^2 = -3\pi\eta a \frac{d(x^2)}{dt} + Xx$$



promediando sobre todas las partículas

$$\frac{m}{2} \frac{d^2 \langle x^2 \rangle}{dt^2} + 3\pi\eta a \frac{d \langle x^2 \rangle}{dt} = kT \quad (7)$$

donde, según Langevin, se eliminó  $\langle Xx \rangle$  por la irregularidad sobre  $X$ . La solución a la ecuación (7) es

$$\frac{d \langle x^2 \rangle}{dt} = \frac{kT}{3\pi\eta a} + C \exp(-6\pi\eta a t/m) \quad (8)$$

Según la estimación de Langevin la exponencial decae muy rápido por lo cual para propósitos prácticos se puede despreciar. Resolviendo la ecuación (8) se obtiene

$$\boxed{\langle x^2 \rangle - \langle x_0^2 \rangle = \frac{kT}{3\pi\eta a} t} \quad (9)$$

con lo cual concuerda con el cálculo realizado por Einstein en la ecuación (5), dando como resultado una relación entre el coeficiente de difusión y la temperatura  $D = kT/6\pi\eta a$ .

La ecuación de Langevin no es más que una *ecuación diferencial estocástica*<sup>3</sup>, aunque Langevin no lo menciona, el hecho de hacer  $\langle Xx \rangle = 0$  es equivalente a la suposición de Einstein sobre la independencia de dos eventos consecutivos. El análisis matemático sobre el proceso llevado por Langevin no llegó hasta 40 años más tarde, cuando Ito formuló los conceptos de las ecuaciones diferenciales estocásticas, en la cual la independencia de  $X$  y  $x$  nos lleva al cálculo de las ecuaciones diferenciales estocásticas.

### 3. Ratchet de Feyman 1962.

El primer ratchet fue planteado alrededor de 1900 por Gabriel Lipman, sin embargo fue popularizado por Feyman en 1962 en sus lecciones de Física en la universidad Cornell University. El planteamiento consiste en dos reservorios, uno a temperatura  $T_2$  que contiene el ratchet o trinquete y el otro a temperatura  $T_1$  que contiene una paleta giratoria o paddle wheel, ver figura 1. La vara que une los ejes es atado un peso de modo que si lograra girar solo en una dirección podría levantarla y así obtener trabajo.

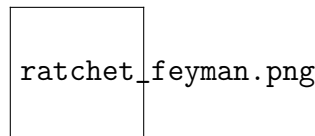


Figura 1: El ratchet de Feyman consiste en un trinquete(ratchet) a lado izquierdo de la figura y una paleta(paddle wheel) al lado derecho. En la vara que une los ejes es colocado un disco la cual es atado una masa que se pretende levantar(con un determinado torque) al girar la paleta en una sola dirección debido al trinquete [6].

<sup>3</sup>Una ecuación diferencial que contiene un término aleatorio y por lo tanto su solución es una función aleatoria.

El objetivo era simple, construir una máquina perpetua, esto se conseguiría gracias a que el movimiento de las moléculas en el recipiente a  $T_1$  golpearían a la paleta y como dicha paleta gira en una dirección (la otra dirección la impide el trinquete) se lograría realizar trabajo [6].

El propio Feynman demostró que la hipótesis plateada en el párrafo anterior no es posible en el equilibrio  $T_1 = T_2$ , ya que el trinquete también sería afectada por las colisiones, de la misma magnitud, por las moléculas de su propio entorno, es decir, el trinquete (pawl) se levantaría permitiendo así a la rueda girar en sentido contrario, no violando así la segunda ley de la termodinámica (no se realiza trabajo en el equilibrio).

En el caso de temperaturas diferentes si se podría realizar trabajo sin embargo esto no violaría alguna ley de la Termodinámica. El planteamiento de Feynman no solo quedo en la teoría, se realizaron experimentos [2], en el cual se afirma las conclusiones de Feynman. El experimento en la realización del ratchet de Feynman nos ayudaría en el estudio del control de información (está relacionado con la entropía), el mecanismo de los motores moleculares y el control de transporte de partículas, mostrando así que el modelo planteado por Feynman es de gran importancia e interés en la actualidad.

En mediados del siglo 20 se desarrollo un gran debate en diferentes campos de la ciencia acerca del funcionamiento de los *motores biológicos*. Se conocia que dichos motores consumian proteínas ATP<sup>4</sup> pero se desconocia sus procesos. Fue entonces que en 1990 aparece una conexión de los motores biológicos con el concepto de ratchet.

---

<sup>4</sup>adenosine triphosphate

### III. Fundamento teórico.

#### 1. Proceso estocástico.

De la teoría de probabilidades tenemos la siguiente afirmación<sup>5</sup> para las probabilidades condicionadas

$$P(A|B) = \frac{P(AB)}{P(B)} \quad (10)$$

donde  $A, B$  son *eventos*<sup>6</sup>.

Un evento puede ser caracterizado por un vector

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots) \quad (11)$$

donde los elementos pueden ser números reales, por ejemplo las posiciones que un conjunto de partículas dentro de una caja pueden tomar, por lo tanto  $\mathbf{x}$  nos indicaría una posible configuración del sistema. Si el sistema puede tener distintas configuraciones  $\mathbf{x}$ , cada una con una cierta probabilidad, defino la variable aleatoria  $\mathbf{X}$ , el cual puede tomar cualquier posible valor de  $\mathbf{x}$

$$\mathbf{X}(\mathbf{x})$$

En un proceso estocástico la variable aleatoria depende de un parámetro, es decir, un proceso estocástico

$$\{\mathbf{X}_t, t \in T\}$$

es una colección de variables aleatorias, esto es, para  $t \in T$ ,  $\mathbf{X}_t$  es una variable aleatoria<sup>7</sup>.

Cuando se mide valores  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots$ , etc de  $\mathbf{X}_t$  en el tiempo  $t_1, t_2, \dots$ , se asume que la densidad de probabilidad del conjunto existe

$$\rho(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \dots) \quad (12)$$

y describe el sistema completamente.

Una vez definido la densidad de probabilidad, se puede enunciar la densidad de probabilidad condicionada a partir de la ecuación (10)

$$\boxed{\rho(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \dots | \mathbf{y}_1, \tau_1; \mathbf{y}_2, \tau_2; \dots) = \frac{\rho(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \dots; \mathbf{y}_1, \tau_1; \mathbf{y}_2, \tau_2; \dots)}{\rho(\mathbf{y}_1, \tau_1; \mathbf{y}_2, \tau_2; \dots)}} \quad (13)$$

<sup>5</sup> $P(AB) = P(A \cup B)$

<sup>6</sup>Cualquier subconjunto del espacio de muestra (todos los posibles resultados de un experimento) es conocido como evento.

<sup>7</sup> $\mathbf{X}_t$  es el estado del proceso en el tiempo  $t$ .

donde  $t$ , que en este caso será el tiempo, tiene el siguiente orden<sup>8</sup>

$$t_1 \gg t_2 \gg \dots \tau_1 \gg \tau_2 \dots \quad (14)$$

De la ecuación (13) se puede decir que el proceso que deseamos conocer esta determinado por el pasado. Estableciendo reglas sobre la probabilidad condicionada se prodrá estudiar el fenómeno, claro que desde un punto de vista estadístico. Es aquí donde se plantea un caso en el cual la probabilidad condicional depende solo de la última condición, que será tratado en la próxima sección.

## 2. Procesos de Markov.

El proceso de *Markov* es formulada en términos de la probabilidad condicional. Teniendo en cuanta la densidad de probabilidad de un proceso estocástico (12), la suposición de Markov nos dice que la probabilidad condicional esta determinado enteramente por el conocimiento de la más reciente condición, es decir

$$p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \dots | \mathbf{y}_1, \tau_1; \mathbf{y}_2, \tau_2; \dots) = p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_3, t_2; \dots | \mathbf{y}_1, \tau_1) \quad (15)$$

Esta misma supoción fue realizada por Einstein en (1), Smoluchowski y otros de manera implícita o explícita en sus trabajos.

Con la suposición de Markov se puede demostrar que [7]

$$p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_3, t_2; \dots; \mathbf{x}_n, t_n) = p(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_2, t_2) p(\mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{x}_3, t_3) \dots \quad (16)$$

$$\dots p(\mathbf{x}_{n-1}, t_{n-1} | \mathbf{x}_n, t_n) p(\mathbf{x}_n, t_n) \quad (17)$$

teniendo en cuenta que

$$t_1 \geq t_2 \geq t_3 \geq \dots \geq t_{n-1} \geq t_n$$

Nos limitaremos a este resultado ya que será suficiente para realizar este trabajo. El principal resultado es que la euación (17) permite demostrar la ecuación de Chapman-Kolmogorov, una ecuación que será utilizado para estudiar la ecuación de Fokker-Plank.

## 3. Ecuación de Chapman-Kolmogorov.

Para los procesos estocásticos podemos establecer dos ecuaciones. La primera de ellas es [7]

$$p(\mathbf{x}_1, t_1) = \int p(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_2, t_2) p(\mathbf{x}_2, t_2) d\mathbf{x}_2 \quad (18)$$

Para la segunda ecuación se tiene en cuenta la suposición de Markov, con lo cual se obtiene

Ecuación de Chapman-Kolmogorov

$$p(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_3, t_3) = \int p(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_2, t_2) p(\mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{x}_3, t_3) d\mathbf{x}_2 \quad (19)$$

---

<sup>8</sup>La validez de la ecuación es independiente del orden de  $t$ , sin embargo para los fenómenos que se describirán es mejor ordenarlos.

Ambas válidas para todo proceso estocástico.

Aunque ambas parecen similar a simple vista, la diferencia es que la ecuación (18) es para probabilidades no condicionadas mientras que para la ecuación (19) si lo es.

#### 4. Ecuación de Langevin.

La ecuación de Langevin puede ser tratada con la densidad de probabilidad de la posición mediante la ecuación de Fokker-Planck, sin embargo para un primer acercamiento al problema y además para obtener propiedades cualitativas sin mucho análisis matemático es conveniente tratarlo de resolver mediante aproximaciones y promedios sobre la propia ecuación. Para nuestros objetivos solo será necesario conocer las características de la densidad de probabilidad y de las colisiones.

De la ecuación (6) se plantea la ecuación de *Langevin*

$$m\ddot{x} = \underbrace{-m\gamma\dot{x}}_{\text{viscosidad}} + \underbrace{F(x)}_{\text{fuerza externa}} + \underbrace{f(t)}_{\text{fuerza aleatoria}} \quad (20)$$

donde  $\gamma$  es el coeficiente de fricción sobre la masa  $\alpha/m$ . Lo especial de la ecuación (20) es la inclusión de una variable aleatoria que en este caso representa a las colisiones.

Considerando el caso en el cual no hay ninguna fuerza externa  $F = 0$ .

$$\begin{aligned} m\ddot{x} &= -m\gamma\dot{x} + f(t) \\ m\dot{v}(t) &= -m\gamma v(t) + f(t) \end{aligned} \quad (21)$$

Para no permitir un móvil perpetuo de segundo tipo las fluctuaciones  $f(t)$  son destinados a ser un *ruido blanco gaussiano*<sup>9</sup> de promedio cero (ver figura 2).

$$\langle f(t) \rangle = 0$$

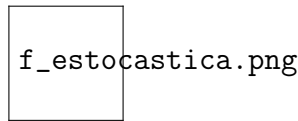


Figura 2: Forma del ruido, o ruido estocástico  $f(t)$  [8].

El carácter estocástico de las colisiones hace que esa influencia decaiga con el tiempo y tenga la forma de la figura 3. El tiempo característico de decaimiento es  $\tau_c$ . Esta escala de tiempo es, en general, mucho mucho menor que la escala de tiempo correspondiente a cambios en  $v$  debido a la mayor inercia de la partícula browniana, por lo tanto podemos aproximarla por la siguiente *relación de correlación*<sup>10</sup>:

$$\langle f(t')f(t) \rangle = g\delta(t - t') \quad (22)$$

<sup>9</sup>Fluctuaciones delta-correlacionadas se nombran como ruido blanco.

<sup>10</sup>Indica cual es la influencia que tiene una fluctuación a tiempo  $t'$  sobre otra a tiempo  $t$ .

donde  $g$  es una medida de la intensidad de ruido.

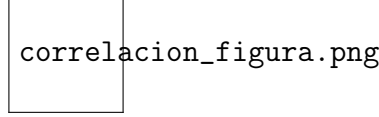


Figura 3: La influencia de la fuerza estocástica decae con el tiempo [8].

De manera formal, la solución de la ecuación de Langevin (21) es

$$v(t) = v_0 e^{-\gamma t} + e^{-\gamma t} \int_0^t e^{\gamma t'} \frac{f(t')}{m} dt' \quad (23)$$

La ecuación (23) es de naturaleza estocástica o aleatoria debido a  $f$  y por lo tanto se necesita realizar un tratamiento estadístico sobre  $v$ . Para resolver el problema debemos encontrar la *densidad de probabilidad*  $\rho(v, t, v_0)$  de que la solución se encuentre entre  $v$  y  $v + dv$ , en el instante  $t$ , cuando  $v = v_0$  en el instante  $t = 0$ . Dicha densidad de probabilidad debe tener ciertas características.

Al inicio la partícula tiene por velocidad  $v_0$  por lo tanto tiene una gran probabilidad que eso sea cierto

$$\rho(v, t \rightarrow 0, v_0) \rightarrow \delta(v - v_0) \quad (24)$$

Con el paso del tiempo la partícula entrará en equilibrio con el medio, por lo tanto obedecerá la distribución de velocidad de Maxwell.

$$\rho(v, t \rightarrow \infty, v_0) \rightarrow \left( \frac{m}{2\pi\kappa_B T} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{mv^2}{2\kappa_B T}} \quad (25)$$

Teniendo en cuenta estas propiedades, se halla el valor medio de la velocidad y el desvío cuadrático medio<sup>11</sup>; razonando en términos de un *ensamble de partículas* sobre la ecuación (23) se calcula, ver [14]

$$\langle v(t) \rangle = v_0 e^{-\gamma t} \xrightarrow{t \gg \gamma^{-1}} 0 \quad (26)$$

$$\langle (\Delta v)^2 \rangle = \frac{g}{2m^2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}) \xrightarrow{t \gg \gamma^{-1}} \frac{g}{2m^2\gamma} \quad (27)$$

Para un tiempo mucho mayor que el tiempo de relajación,  $\gamma^{-1}$ , no queda rastro de la velocidad inicial y el valor medio de la velocidad es 0, a partir de ese momento podemos considerar que la partícula browniana está en equilibrio térmico con el medio. Suponiendo que en el equilibrio térmico hay una distribución de Maxwell de la velocidad, la desviación cuadrática media para

<sup>11</sup>También llamado dispersión, segundo momento o varianza

un tiempo muy largo debe ser igual a  $\langle(\Delta v)^2\rangle = \kappa_B T/m$ ,<sup>12</sup>. De donde se obtiene, igualando a la ecuación (27), la siguiente relación con la intensidad de ruido

$$\boxed{g = 2\kappa_B T \gamma m} \quad (28)$$

Una propiedad importante que se puede obtener es la función de correlación de la velocidad, de la ecuación (23) y teniendo en cuenta las propiedades de  $f$  se obtiene [14] :

$$\langle v(t')v(t'') \rangle = v_0^2 e^{-\gamma t' - \gamma t''} + e^{-\gamma t' - \gamma t''} \int_0^{t'} \int_0^{t''} e^{\gamma y + \gamma z} \langle \frac{f(y)f(z)}{m^2} \rangle dy dz$$

mediante un cálculo cuidadoso sobre  $f$  se obtiene

$$\langle v(t')v(t'') \rangle = v_0^2 e^{-\gamma(t'+t'')} + e^{-\gamma(t'+t'')} \frac{g}{2m^2\gamma} \begin{cases} e^{2t'\gamma-1} & , t'' > t' \\ e^{2t''\gamma-1} & , t'' < t' \end{cases} \quad (29)$$

La ecuación anterior nos permite hallar finalmente la correlación temporal de la velocidad, siendo  $t, t' \gg \gamma^{-1}$

$$\boxed{\langle v(t)v(t') \rangle \xrightarrow{t, t' \gg \gamma^{-1}} \frac{g}{2m^2\gamma} e^{-\gamma|t-t'|}} \quad (30)$$

Esta última ecuación indica que la velocidad se descorrelaciona de sí misma exponencialmente con el tiempo.<sup>13</sup>

Para encontrar la relación con el coeficiente de difusión  $D$ , se calcula la desviación cuadrática de la posición. Teniendo en cuenta que la posición es dada por la ecuación

$$x(t) = x_0 + \int_0^t v(\tau) d\tau \quad (31)$$

promediando y teniendo en cuenta el resultado de la ecuación (26) se obtiene

$$\boxed{\langle x(t) \rangle = x_0 + \frac{v_0}{\gamma} [1 - e^{-\gamma t}]} \quad (32)$$

Por otro lado, elevando al cuadrado la ecuación (31) y volviendo a promediar.

$$\langle x(t)^2 \rangle = x_0^2 + \frac{2x_0 v_0}{\gamma} [1 - e^{-\gamma t}] + \int_0^t \int_0^t \langle v(t')v(t'') \rangle dt' dt'' \quad (33)$$

Vemos que aparece la relación de correlación de la velocidad dentro de un integral doble. Utilizando la ecuación (29) se obtiene [14]:

$$\langle x(t)^2 \rangle = x_0^2 + \frac{2x_0 v_0}{\gamma} [1 - e^{-\gamma t}] + \frac{v_0^2}{\gamma^2} (1 - e^{-\gamma t})^2 + \frac{\kappa_B T}{m\gamma^2} (2\gamma t - 3 + 4e^{-\gamma t} - e^{-2\gamma t}) \quad (34)$$

<sup>12</sup>Por el teorema de equipartición.

<sup>13</sup>El valor de la velocidad a un tiempo  $t$  no influye sobre su valor a  $t'$  cuando  $|t - t'|$  es mucho mayor que  $\gamma^{-1}$

De donde se obtiene para tiempos largos, suponiendo  $x_0 = 0, v_0 = 0$

$$\boxed{\langle x(t)^2 \rangle \xrightarrow{t \text{ largo}} 2 \frac{\kappa_B T}{m\gamma} t} \quad (35)$$

Como la difusión de partículas cumple la ley de Fick y la ley de conservación, la densidad de probabilidad de la posición cumple la ecuación de difusión el cual se relaciona con el coeficiente de difusión  $D$

$$\frac{\partial \rho_x}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho_x}{\partial x^2} \quad \text{Ecuación de difusión.} \quad (36)$$

donde  $\rho_x$  es la densidad de probabilidad de la posición.

Utilizando el cálculo del valor medio de la posición al cuadrado por medio de la densidad de probabilidad  $\rho_x$

$$\langle x(t)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 \rho_x(x, t) \quad (37)$$

derivamos respecto al tiempo la ecuación (37), integrando por partes y usando la ecuación (36) se obtendrá <sup>14</sup>, [8].

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

integrando y considerando que  $\langle x(0)^2 \rangle = 0$  tenemos

$$\boxed{\langle x(t)^2 \rangle = 2Dt} \quad (38)$$

con lo cual vemos de la ecuación (35) y (38) la siguiente relación

$$\boxed{\frac{\kappa_B T}{m\gamma} = D} \quad \text{Difusión-temperatura.} \quad (39)$$

Resumiendo todas las relaciones encontradas con la intensidad de ruido  $g$ , el coeficiente de difusión  $D$ , la temperatura  $T$ , constante de Boltzman  $\kappa_B$ , la masa y el coeficiente viscosidad  $\alpha = \gamma m$

$$\boxed{g = 2\kappa_B T \gamma m} \quad \text{Ruido-temperatura.} \quad ; \quad \boxed{D = \frac{g}{2\gamma^2 m^2}} \quad \text{Difusión-ruido.} \quad (40)$$

$$2D = \mu^2 g, \quad \mu = \frac{1}{m\gamma}$$

Teniendo en cuenta todas las características enunciadas, planteo la ecuación de Langevin de la siguiente forma

$$\boxed{m\ddot{x} = -m\gamma\dot{x} + F(x) + m\gamma\sqrt{2D}\xi} \quad (41)$$

<sup>14</sup>  $x^2 \frac{\partial \rho}{\partial x}$  y  $x \rho$  evaluados en el infinito son cero



donde la fuerza estocástica a sido reemplazada mediante el siguiente cambio

$$f(t) = \sqrt{g}\xi(t) = \sqrt{2D}m\gamma\xi(t) \quad (42)$$

donde

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \delta(t - t')$$

Como veremos, la ecuación (41) será de utilidad a la hora de simular y de utilizarlo en la deducción de la ecuación de Fokker- Planck.

## 5. Ecuación de Fokker-Planck.

El objetivo es encontrar la ecuación diferencial en derivadas parciales de la densidad de probabilidad  $P(x, t|x_0)$ , cuando  $x(t)$  obedece la ecuación de Langevin.

Consideremos la ecuación (41), donde se aplica un campo de fuerza que dependa de la posición  $F(x)$

$$m\ddot{x} = -m\gamma\dot{x} + F(x) + m\gamma\sqrt{2D}\xi$$

Considerando el caso de amortiguamiento fuerte, en el que la partícula browniana se encuentra casi todo el tiempo moviendose a la velocidad límite, donde se satisface  $m\gamma\dot{x} \gg m\ddot{x}$ . Por lo tanto la ecuación inicial pasa a ser

$$\boxed{\dot{x} = A(x) + \sqrt{2D}\xi} \quad (43)$$

$$A(x) = \mu F(x); \quad \mu = (m\gamma)^{-1}$$

el cual recibe el nombre genérico de ecuacion de langevin.

Integrando la ecuación (43) para un tiempo infenitesimal  $\epsilon$

$$\begin{aligned} x(t + \epsilon) - x(t) &= \epsilon A(x(t)) + \sqrt{2D} \int_t^{t+\epsilon} \xi(s) ds \\ x - y &= \epsilon A(y) + \sqrt{2D} \int_t^{t+\epsilon} \xi(s) ds \\ x - y - \epsilon A(y) &= \sqrt{2D} \int_t^{t+\epsilon} \xi(s) ds \end{aligned} \quad (44)$$

En esta notación,  $x(t)$  es el valor de la posición para una realización de ruido determinada, según la ecuación de langevin, y  $x$  es un valor cualquiera de la posición cuya probabilidad desamos conocer. *La probabilidad de que  $x(t + \epsilon)$  tome el valor  $x$ , dado  $x(t) = y$ , es igual a la probabilidad de tener la fluctuación correspondiente(lado derecho de la ecuación).* Dicha fluctuación será definida como

$$\boxed{Z(\epsilon) = \int_t^{t+\epsilon} \xi(s) ds; \quad \text{integral estocástica.}} \quad (45)$$

Por lo tanto la ecuación (44) queda como

$$x - y - \epsilon A(y) = \sqrt{2D}Z \quad (46)$$

La integral (45) es una variable estocástica; la integral sobre el rango  $(t, t + \epsilon)$  es similar a la suma de variables Gaussianas  $\xi$ , entonces  $Z(\epsilon)$  es una variable gaussiana. Lo cual implica que la distribución de probabilidad de  $Z(\epsilon)$  esta determinada una vez que el promedio y la desviación estándar son conocidas. Es por ello que se puede generar una variable aleatoria gaussiana, con el promedio y desviación estándar apropiados para simular la integral estocástica.

Veamos las propiedades estadísticas de  $Z(\epsilon)$

$$\begin{aligned} \langle Z(\epsilon) \rangle &= \int_t^{t+\epsilon} \langle \xi(t) \rangle dt = 0 \\ \langle Z(\epsilon)^2 \rangle &= \int_t^{t+\epsilon} \int_t^{t+\epsilon} \langle \xi(q)\xi(s) \rangle dq ds \\ &= \int_t^{t+\epsilon} \int_t^{t+\epsilon} \delta(q-s) ds dq \\ &= \int_t^{t+\epsilon} dq = \epsilon \\ \sigma_Z &= \sqrt{\langle Z^2 \rangle - \langle Z \rangle^2} = \sqrt{\epsilon} \end{aligned}$$

resumiendo

$$\langle Z \rangle = 0, \quad \langle Z^2 \rangle = \epsilon, \quad \sigma_Z = \sqrt{\epsilon} \quad (47)$$

Si introducimos una variable aleatoria gaussiana  $Y$  de promedio cero y desviación estándar 1 podemos reemplazar a  $Z(\epsilon)$  por medio de la siguiente relación

$$\boxed{Z(\epsilon) = \sqrt{\epsilon}Y} \quad (48)$$

$$\langle Y \rangle = 0, \quad \sigma_Y = 1$$

con lo cual vemos que es del orden  $\sqrt{\epsilon}$ .

Una vez analizado la variable  $Z$  y teniendo en cuenta lo ya mencionado, es decir que las densidad de probabilidad de la posición y de la fluctuacion  $Z$  están relacionadas, sea  $P_Z$  la densidad de probabilidad de las fluctuaciones, entonces de (44)

$$\begin{aligned} P(x, t + \epsilon | y, t) &= P_Z(x - y - \epsilon A(y)) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} P_Z(Z) \delta(Z - x + y + \epsilon A(y)) dZ \\ &= \langle \delta(\sqrt{2D}Z - x + y + \epsilon A(y)) \rangle \end{aligned} \quad (49)$$

Donde el promedio sobre la ecuación (49) es sobre las configuraciones de ruido. Como  $Z$  es del orden  $\sqrt{\epsilon}$ , por lo tanto (49) esta evaluada en  $y - x$  mas una pequeña perturbación  $Z + \epsilon A(y)$ .

Desarrollando en serie alrededor de  $y - x$

$$\begin{aligned} \delta((y - x) + \epsilon A(x) + Z) &= \delta(y - x) + \delta'(y - x)[\epsilon A(y) + \sqrt{2D}Z] \\ &\quad + \delta''(y - x) \frac{[\epsilon A(y) + \sqrt{2D}Z]^2}{2} + \dots \end{aligned}$$

luego tomamos el promedio en configuraciones de ruido y solo considerando términos de primer orden sobre  $\epsilon$

$$\begin{aligned} \langle \delta((y - x) + \epsilon A(x) + Z) \rangle &\approx \delta(y - x) + \delta'(y - x)[\epsilon A(y) + \sqrt{2D}\langle Z \rangle] \\ &\quad + \delta''(y - x) \frac{[\epsilon^2 A(y)^2 + 2A(x)\sqrt{2D}\langle Z \rangle + 2D\langle Z^2 \rangle]}{2} \end{aligned}$$

teniendo en cuenta (47), obtenemos finalmente

$$\boxed{P(x, t + \epsilon | y, t) \approx \delta(y - x) + \delta'(y - x)\epsilon A(y) + \delta''(y - x)\epsilon D} \quad (50)$$

El proceso descrito por la ecuación de Langevin es markoviano porque el ruido es delta-correlaciona<sup>15</sup>. Para procesos de este tipo la probabilidad condicional satisface la ecuación de Chapman-Kolmogorov

$$P(x_3, t_3 | x_1, t_1) = \int P(x_3, t_3 | x_2, t_2) P(x_2, t_2 | x_1, t_1) dx_2; \quad t_1 \leq t_2 \leq t_3$$

Considerando un tiempo infinitesimal luego  $(x_0 | t_1 = 0)$ ,  $(y | t_2 = t)$ ,  $(x | t_3 = t + \epsilon)$ , obtenemos

$$P(x, t + \epsilon | x_0, 0) = \int P(x, t + \epsilon | y, t) P(y, t | x_0, 0) dy$$

insertando la ecuación (50)

$$P(x, t + \epsilon | x_0, 0) = \int (\delta(y - x) + \delta'(y - x)\epsilon A(y) + \delta''(y - x)\epsilon D) \times P(y, t | x_0, 0) dy$$

teniendo en cuenta las propiedades de los delta [4]

$$\begin{aligned} P(x, t + \epsilon | x_0) &= P(x, t | x_0) + (-1)^1 \frac{\partial}{\partial x} [\epsilon A(x) P(x, t | x_0)] + (-1)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} [D \epsilon P(x, t | x_0)] \\ P(x, t + \epsilon | x_0) &= P(x, t | x_0) + \epsilon \left[ -\frac{\partial}{\partial x} A(x) P(x, t | x_0) + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t | x_0) \right] \\ \frac{P(x, t + \epsilon | x_0) - P(x, t | x_0)}{\epsilon} &= -\frac{\partial}{\partial x} A(x) P(x, t | x_0) + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t | x_0) \end{aligned}$$

obteniendo así la *ecuación de Fokker-Plack*.

$$\boxed{\frac{\partial P(x, t | x_0)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} A(x) P(x, t | x_0) + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t | x_0)} \quad (51)$$

<sup>15</sup>En un proceso markoviano el estado futuro esta determinado solo por el conocimiento del estado presente

La densidad de probabilidad  $P(x, t)$  se obtiene a partir de la condición inicial

$$P(x, t) = \int P(x, t|x_0, 0)P(x_0, 0)dx_0 \quad (52)$$

aplicando sobre la ecuación (51)

$$\boxed{\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}A(x)P(x, t) + D\frac{\partial^2}{\partial x^2}P(x, t)} \quad (53)$$

la diferencia con (51) es que la condición inicial no necesariamente es una delta de Dirac. Sin embargo, en general es conveniente solucionarla (con una delta de dirac como condición inicial) y luego usar (52) para obtener  $P(x, t)$  y así obtener (53).

En el caso cuando  $A(x)$  es un potencial y  $D$  es una constante, la ecuación resultante es la ecuación de Smoluchowski.

Se define la *corriente de probabilidad*

$$J(x, t) = A(x)P(x, t) - D\frac{\partial P(x, t)}{\partial x} \quad (54)$$

la ecuación (53) queda

$$\boxed{\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial J(x, t)}{\partial x}} \quad (55)$$

## 6. Soluciones estacionarias.

En un proceso estacionario se tiene

$$\frac{\partial P}{\partial t} = 0 \rightarrow \frac{\partial J}{\partial x} = 0 \quad (56)$$

con lo cual se busca la solución de la siguiente ecuación

$$A(x)P(x) - D\frac{dP(x)}{dx} = J = cte$$

la solución de la ecuación anterior esta dada por [1]

$$\boxed{P(x) = Ne^{-\Phi(x)} - Je^{-\Phi(x)} \int^x \frac{e^{\Phi(x')}}{D} dx'} \quad (57)$$

donde las dos constantes de integración  $N$  y  $J$ , estan determinadas por la normalización y la condición de frontera, además  $\Phi$  esta dada por

$$\boxed{\Phi(x) = \ln D - \int^x \frac{A(x')}{D} dx'} \quad (58)$$

### Movimiento Browniano con potenciales periódicos.

Recordando la ecuación inicial

$$\dot{x} = A(x) + \sqrt{2D}\xi \quad (59)$$

se demuestra que la forma de la ecuación se mantiene cuando se trabaja adimensionalmente<sup>16</sup>. Se considera el siguiente potencial  $U$ , donde el potencial  $V$  es periódico

$$U(x) = V(x) - Fx, \quad V(x+1) = V(x) \quad (60)$$

se obtiene la siguiente relación

$$A(x) = -V'(x) + F = U'(x)$$

$$U(x) = V(x) - F \cdot x \quad (61)$$

donde se demuestra fácilmente que

$$U(n+x) = U(x) + F \cdot n, \quad n : \text{entero positivo} \quad (62)$$

De la ecuación (58)

$$\Phi(x) = \frac{U(x)}{D} + cte \quad (63)$$

por lo tanto se obtiene la siguiente solución dado por (57)

$$P(x) = Ne^{-U(x)/D} - \frac{J}{D}e^{-U(x)/D} \int_0^x e^{U(x')/D} dx' \quad (64)$$

Se demuestra que si  $P(x)$  es acotada para todo  $n$  se debe cumplir que

$$N = \frac{J \int_0^1 e^{-U(x')/D} dx'}{D(1 - e^{-F/D})} \quad (65)$$

siendo (65) la primera ecuación que determina las constantes de integración. La ecuación (65) también demuestra que  $P$  es periódica

$$P(x+1) = P(x) \quad (66)$$

por lo tanto se debe normalizar en el intervalo de periodicidad (0 a 1), obteniendo así la segunda ecuación para las constantes de integración  $J, N$

$$\int_0^1 P(x) dx = N \int_0^1 e^{-U(x')/D} dx' - \frac{J}{D} \int_0^1 e^{-U(x)/D} \int_0^x e^{-U(x')/D} dx' dx = 1 \quad (67)$$

---

<sup>16</sup>Se estudiará en la sección del modelo simplificado estocásticos donde  $x_{adim} = x/L$ ,  $L$  es el periodo del potencial  $V$

Despejando la constante  $J$  en las ecuaciones (65) y (67) se obtiene

$$J = \frac{D(1 - e^{-F/D})}{\int_0^1 e^{U(x)/D} dx \int_0^1 e^{-U(x)/D} dx - (1 - e^{-F/D}) \int_0^1 e^{-U(x)/D} \left( \int_0^x e^{U(x')/D} dx' \right) dx} \quad (68)$$

Calculando la velocidad promedio de la ecuación (59) se obtiene

$$\langle v \rangle = J \quad (69)$$

que muestra la relación entre la corriente de probabilidad y la velocidad media, más adelante se evaluara para un potencial  $V(x)$  específico denominado *potencial ratchet* para diferentes fuerzas.

## 7. Soluciones no estacionarias: Proceso Wiener

Encontrar la solución en el caso no estacionario<sup>17</sup> es muy difícil, para un primer acercamiento veamos al caso simple cuando

$$A(x) = 0$$

reemplazando en la ecuación (51), la ecuación a resolver es

$$\boxed{\frac{\partial P(x, t|x_0)}{\partial t} = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t|x_0)} \quad (70)$$

Este caso especial recibe el nombre de proceso Wiener<sup>18</sup>, el cual describe de una forma ideal el movimiento browniano [7].

Teniendo en cuenta como condicion inicial<sup>19</sup>

$$P(x, t_0|x_0, t_0) = \delta(x - x')$$

mediante Transformadas de Fourier se logra obtener la solución [1]

$$\boxed{P(x, t|x_0, t_0) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D(t - t')}} \exp\left\{-\frac{(x - x')^2}{4D(t - t')}\right\}} \quad (71)$$

se grafica la función (71)

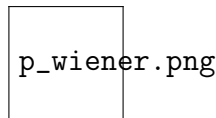


Figura 4: Se grafica la densidad de probabilidad donde  $x_0 = 0$ ,  $t_0 = 0$  y  $D = 0,01$  para diferentes tiempos.

<sup>17</sup>la densidad de probabilidad depende del tiempo

<sup>18</sup>Wiener fue quien estudio el movimiento browniano extensivamente antes que Einstein.

<sup>19</sup>Al inicio  $t_0$  las partículas están concentradas en  $x_0$ .

Se observa en la figura 4 que al transcurrir el tiempo la densidad de probabilidad se aplanan, una característica importante en el proceso de difusión de una partícula.

De la densidad de probabilidad se puede obtener la posición media y la desviación estándar<sup>20</sup>

$$\langle x \rangle = x_0 \quad (72)$$

$$\langle x^2 - x_0^2 \rangle = 2D(t - t_0) = \sigma_x^{1/2} \quad (73)$$

resultados ya obtenidos por Langevin y Eintein.

## 8. Algoritmo para resolver ecuaciones diferenciales estocásticas.

Una ecuación diferencial estocástica tiene la forma general

$$\dot{x}_i = F_i(\vec{x}) + G_i(\vec{x})\xi(t); \quad \langle \xi(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(t)\xi(s) \rangle = \delta(t - s) \quad (74)$$

donde suponemos que el proceso estocástico es un *ruido Gaussiano blanco*<sup>21</sup>.

Para el caso unidimensional la ecuación (74) toma la forma

$$\boxed{\dot{x} = F(x) + G(x)\xi(t)} \quad (75)$$

Una aproximación simple para resolver (74) es integrarla para un paso de tiempo  $h$ , para ello realizamos un desarrollo de Taylor alrededor de  $t = 0, x = x_0$ .

Realizando un desarrollo de Taylor de  $F$  y  $G$  alrededor del punto  $t = 0, x(0) = x_0$ , dentro del integrando

$$x(h) - x(0) = \int_0^h (F_0 + (x - x_0)F'_0 + \dots + G_0\xi + (x - x_0)G'_0\xi + \dots)dt \quad (76)$$

donde

$$F_0 = F(x(0)), \quad F'_0 = \left. \frac{\partial F(x(t))}{\partial x(t)} \right|_{x=x(0)}, \quad \dots$$

$$G_0 = G(x(0)), \quad G'_0 = \left. \frac{\partial G(x(t))}{\partial x(t)} \right|_{x=x(0)}, \quad \dots$$

Teniendo en cuenta de las propiedades de la *integral estocástica* ya demostrada (47)

$$Z(h) \equiv \int_0^h \xi(t)dt, \quad \text{integral estocástica}$$

$$\langle Z(h) \rangle = 0$$

$$\langle Z(t)^2 \rangle = \sqrt{h}$$

$$\sigma_Z = \sqrt{\langle Z^2 \rangle - \langle Z \rangle^2} = \sqrt{h}$$

<sup>20</sup>En los libros la variable aleatoria para el proceso Wiener se denotada con  $w$ , en este caso seria  $w \rightarrow x$ .

<sup>21</sup> $x$  tiene una distribución gaussiana.

Introduciendo una variable aleatoria  $Y$  de promedio cero y desviación estándar 1, podemos reemplazar a  $Z(h)$  con la siguiente igualdad

$$Z(h) = \sqrt{h}Y \quad (77)$$

con lo cual se observa que es del orden  $\sqrt{h}$ , como  $hF_0$  es de primer orden en  $h$  con  $F_0 = cte$ , debemos agregar mas términos del desarrollo de Taylor para  $G(x)$ , obteniendose así una aproximación a primer orden.

De la ecuación (76)

$$x(h) - x_0 = hF_0 + G_0Z(h) + \underbrace{G'_0 \int_0^h (x(t) - x_0)\xi dt}_{\text{término agregado}} \quad (78)$$

considerando solo el orden más bajo posible para el término agregado<sup>22</sup>

$$x(t) - x_0 \approx hF_0 + G_0Z(t), \quad t < h$$

y teniendo en cuenta que  $dZ = \xi(t)dt$ , reemplazando en la ecuación (78)

$$\begin{aligned} x(h) - x(0) &= hF_0 + G_0Z(h) + G'_0 \int_0^h (hF_0 + G_0Z(t))\xi(t)dt \\ x(h) - x(0) &= hF_0 + G_0Z(h) + G'_0hF_0 \int_0^h \xi(t)dt + G'_0G_0 \int_0^h Z(t)\xi(t)dt \\ x(h) - x(0) &= \underbrace{hF_0}_{\text{orden } h} + \underbrace{G_0Z(h)}_{\text{orden } \sqrt{h}} + \underbrace{G'_0hF_0Z(h)}_{\text{orden } h^{3/2}} + \underbrace{G'_0G_0 \frac{Z(h)^2}{2}}_{\text{orden } h} \end{aligned}$$

de donde finalmente obtenemos una aproximación de primer orden en  $h$

$$\boxed{x(h) - x_0 = hF_0 + G_0Z(h) + G'_0G_0 \frac{Z(h)^2}{2}} \quad (79)$$

<sup>22</sup>se vera que esta igualdad cumple lo mencionado



#### IV. Modelo simplificado estocástico.

Como un primer tratamiento en la simulación de una ecuación de Langevin se considera un potencia periódico y asimétrico espacialmente (*potencial ratchet* [1],[12] ).

Sea la ecuación de Langevin sobreamortiguada (41)

$$m\gamma\dot{x} = -\frac{dV}{dx} + F + m\gamma\sqrt{2D}\xi(t) \quad (80)$$

$$\boxed{\dot{x} = -\frac{1}{m\gamma}\frac{dV}{dx} + \frac{1}{m\gamma}F + \sqrt{2D}\xi(t)}$$

$$\langle\xi\rangle = 0, \quad \langle\xi(t)\xi(t')\rangle = \delta(t-t')$$

con  $F = cte$  y el potencial dado por (*potencial ratchet*) [12]

$$V(x) = V_1 - V_0 \left[ \sin\left(2\pi\left(\frac{x-x_0}{L}\right)\right) + \frac{1}{4}\sin\left(4\pi\left(\frac{x-x_0}{L}\right)\right) \right]$$

$$V(x) = V(x+L)$$

$$L : \text{periodo espacial}$$

Definiendo las variables adimensionales

$$x_n = \frac{x}{L} \quad t_n = t\gamma \quad F_n = \frac{F}{m\gamma^2 L} \quad (81)$$

$$D_n = \frac{D}{\gamma L^2} \quad V_{0n} = \frac{V_0}{m\gamma^2 L} \quad \xi_n = \frac{\xi}{\sqrt{\gamma}} \quad (82)$$

se realiza un cambio de variables para obtener una ecuación adimensional

$$\boxed{\dot{x}_n = -\left(\frac{dV_n}{dx_n} - F_n\right) + \sqrt{2D_n}\xi_n(t_n)} \quad (83)$$

$$\langle\xi(t_n)\xi(t'_n)\rangle = \delta(t_n - t'_n), \quad V_n(x_n + 1) = V_n(x_n) \quad (84)$$

Con el potencial ratchet adimensional :

$$V_n(x_n) = V_{0n} \left[ C + \sin(2\pi(x_n - x_{0n})) + \frac{1}{4}\sin(4\pi(x_n - x_{0n})) \right]$$

$$C \approx -1,1 \quad x_{0n} \approx -1,9$$

Reordenando la ecuación adimensional (84) y omitiendo el subíndice  $n$

$$\boxed{\dot{x} = -\frac{dU}{dt} + \sqrt{2D}\xi(t), \quad U = V(x) - F \cdot x} \quad (85)$$

Comparando con la ecuación (75) y (79), teniendo en cuenta el cambio de variable (77), es decir, construyendo la aproximación correspondiente para su simulación, se obtiene el siguiente

resultado

$$\begin{aligned}
 F &= -U', \quad G = \sqrt{2D} \\
 \boxed{x(h) = x_0 + h(-U')|_{x_0} + \sqrt{2Dh}Y} & \\
 \langle Y \rangle &= 0, \quad \langle Y^2 \rangle = 1
 \end{aligned} \tag{86}$$

Veremos que aunque se trate de una caso simple, mediante una pequeña modificación sobre el potencial se obtendrá un fenómeno que sigue siendo tema de investigación en las últimas décadas.

**Observación:** Recordando que los resultados son valores numéricos adimensionales dadas por las ecuaciones (82), los valores numéricos presentados dependerán del medio en el cual se estudie, por ejemplo, al enunciar que se trabaja con  $D = 0,1$ , este valor no tiene unidades y el valor real será relacionado con  $D = 0,1 \cdot \gamma L^2$ , lo cual depende del medio mediante  $\gamma$ . Como se menciona en el trabajo, se ignora los posibles medios en el cual se estudia el movimiento browniano para poder analizar el propio movimiento. El estudio detallado sobre el comportamiento de una partícula browniano en un medio particular se deja para futuros trabajos como es el caso de la sustancia en el interior de una célula.

## V. Resultados.

Antes de describir los resultados de las simulaciones, se definen los parámetros que se utilizaran

$F$  : Módulo de la fuerza externa.

$D$  : Coeficiente de difusión.

$h = \Delta t$  : Intervalos de tiempo.

$t$  : Tiempo a considerar.

$dN$  : Cada cuantos pasos se almacenan los datos.

Aunque las variables ahora son adimensionales se seguirá manteniendo sus nombre como por ejemplo  $t$  es el tiempo y  $x$  la posición.

### 1. Simulación del proceso Wiener.

Considerando el caso sin potencial ratchet  $V = 0$  ni fuerza constante  $F = 0$ , con lo cual obtenemos de (86)

$$x(h) = x_0 + \sqrt{2Dh}Y \quad (87)$$

Considerando los siguientes parámetros en la simulación

$$D = 0,1; \quad \Delta t = 0,00005 \quad t = 10$$

$$N_{pasos} = \frac{t}{\Delta t} = 2 \cdot 10^5; \quad dN = 1000$$

se grafica la posición media de 1000 partículas

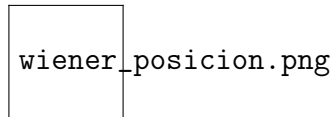


Figura 5: Simulación de 1000 partículas para el proceso Wiener.

El resultado en la figura 5 está de acuerdo con el modelo planteado cuyo resultado esta dado por la ecuación (72), es decir, en promedio las partículas se mantienen en la posición inicial.

De manera similar se realiza la simulación para la posición cuadrática media, el cual se obtiene la siguiente figura

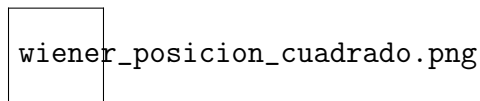


Figura 6: Simulación de 1000 partículas para el proceso Wiener.

De la ecuación (73) vemos que el resultado de la figura 6 era el esperado. De la figura también podemos obtener la pendiente de manera aproximada que es 0,2. Teniendo en cuenta que  $D = 0,1$  podemos confirmar las suposiciones y aproximaciones realizadas con las ecuaciones (38) y (73) que describen este proceso.

Una característica del proceso Wiener sobre la velocidad puede mostrarse también de la simulación y es que la velocidad presente mayor irregularidad.

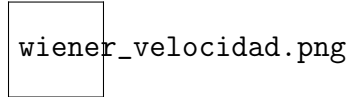


Figura 7: Velocidad media de 1000 partículas para el proceso Wiener.

Como se mencionó en la introducción la posición dada por el proceso Wiener no es diferenciable, de donde podríamos obtener valores infinitos para las velocidades. Esto se debe a que el proceso Wiener es una idealización del movimiento Browniano, un modelo más realista es el proceso *Ornstein-Unlenbeck* [7]

$$\partial_t \rho = \partial_x(kx\rho) + \frac{1}{2}D\partial_x^2 \rho \quad (88)$$

donde se agregó el término de derivada lineal  $\partial_x(kx\rho)$ .

Una última característica de un proceso Wiener nos dice que el camino es extremadamente no reproducible. Para observar este caso se considera 3 partículas con los parámetros ya mencionados moviéndose en una dimensión<sup>23</sup>. De la simulación se obtiene

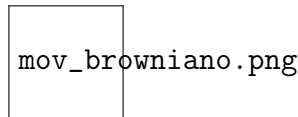


Figura 8: Caminos tomados por 3 partículas en el proceso Wiener. El eje horizontal es el tiempo mientras que el eje vertical son las posiciones, el camino de cada partícula se representa con un color diferente.

El hecho que de se obtenga caminos muy diferentes aun cuando las partículas inician en la misma posición se debe a que la desviación crece con el tiempo.

## 2. Características del potencial ratchet.

Antes de aplicar el potencial ratchet al movimiento browniano y analizar lo efectos sobre la ecuación de Langevin, veamos primero las características del potencial ratchet  $V$

<sup>23</sup>En el caso de 2 dimensiones, teniendo en cuenta que las componentes en dos dimensiones de las colisiones son totalmente independientes, se puede aplicar la ecuación (87) en cada dimensión por separado.

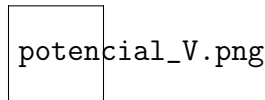


Figura 9: El potencial Ratchet es periódico y asimétrico espacialmente.

Considerando el caso en el que se presenta una fuerza constante  $F = -1$ , la gráfica del potencial será la siguiente

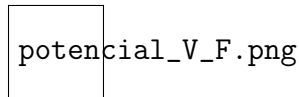


Figura 10: Agregando una fuerza constante  $F = -1$ , con lo cual se suma un potencial  $V_F = x$  al potencial Ratchet.

La adición de un fuerza constante cuya dirección es negativa no fue arbitraria, más adelante se observará que realizando algunas variantes sobre el potencial ratchet, este resultará en una corriente de partículas por lo cual la fuerza constante representará una peso que podrían trasladar dichas partículas como sucede con los motores moleculares.

Una característica importante del potencial ratchet son sus pozos de potencial, ya que si consideramos a las partículas brownianas sobre el cual se le aplica dicho potencial, estas tendrán energías cinéticas debido al movimiento caótico el cual podrían utilizar para escapar del pozo de potencial.

Para ver de manera más clara porque es un pozo de potencial y su comportamiento, se grafica la fuerza debido al potencial ratchet 9

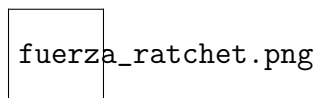


Figura 11: Fuerza debido al potencial Ratchet.

De la figura 11 las partículas se mantendrían en  $F(x) = 0$ , sin embargo en el potencial ratchet hay dos lugares donde se cumple dicha condición, en los picos y valles. Es en los valles donde se encuentra un punto de equilibrio, y dichos puntos se encuentran al lado izquierdo de los valles en la figura 11.

La forma de la fuerza ratchet se mantiene aun cuando se la aplica una fuerza constante(solo se desplaza sobre el eje y).

Una característica que se observa en la fuerza ratchet 11, son los pequeños valles que aparecen en el eje vertical positivo, esto se debe a que el propio potencial ratchet esta formado por dos funciones senos, la de menor amplitud es la que no se puede apreciar bien en el potencial 9 y

sin embargo aparece en 11. Estos pequeños valles se les puede despreciar al ser comparados con los valles a  $F = -1,5$ , lo cual tendrán mayor protagonismo en las simulaciones y mayor efecto sobre el movimiento caótico de las partículas.

### 3. Simulación para diferentes coeficientes de difusión $D$ .

Antes de considerar el potencial ratchet, veamos el comportamiento de las partículas para diferentes coeficientes de difusión para el caso de 4 partículas. Tener en cuenta que el potencial solo es mostrado para tener en cuenta las posiciones de los pozos de potenciales

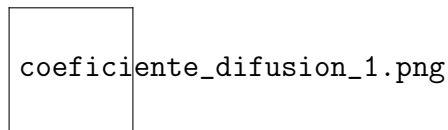


Figura 12: Cada color representa a una partícula, el potencial se grafica solo para tener en cuenta el lugar de los pozos de potencial ya que el eje vertical representa al  $t$ .

Vemos que las partículas no se mantienen en el pozo de potencial, como el coeficiente de difusión está relacionado directamente con la temperatura (masa y viscosidad se mantiene constantes) según la ecuación (39), las partículas tienen la energía cinética suficiente para poder salir de los pozos de potencial.

Simulando con un coeficiente de difusión menor al anterior

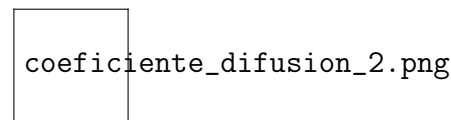


Figura 13: Simulación para 4 partículas con  $D = 1$ .

De la figura (13) se observa que aun hay partículas que no se mantienen en el pozo del potencial ratchet.

Realizando una última simulación con  $D = 0,01$ , es decir, disminuyendo la temperatura del sistema

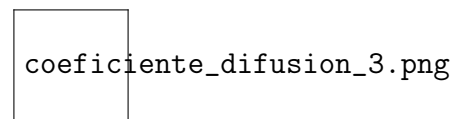


Figura 14: Simulación del movimiento para 4 partículas con coeficiente  $D = 0,01$ .

En este último resultado las partículas se mantienen en dos diferentes pozos de potencial, como en un inicio se encuentran en un pico del potencial (este punto es no estable) y si tomamos en cuenta las fluctuaciones las partículas podrían ser empujadas a cualquier lado, razón por la cual

las partículas se posicionan en dos pozos diferentes del potencial.

Teniendo en cuenta las relaciones de  $D$  con las demás variables del sistema, se busca un medio para el cual las partículas se mantengan en un pozo del potencial, por el momento se ignora dicho medio y solo se tendrá en cuenta para que valor de  $D$  la partícula se mantiene en el pozo.

#### 4. Velocidad media con el potencial ratchet.

Con el coeficiente de difusión  $D = 0,01$  aplicamos el potencial ratchet  $V(x)$ , simulando la velocidad promedio  $\langle v \rangle$  de 100 partículas

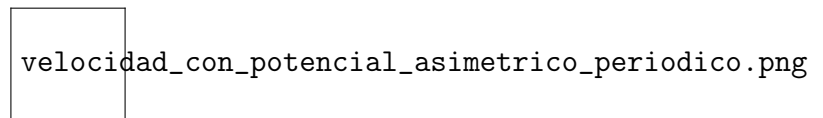


Figura 15: Velocidad promedio de 100 partículas afectadas por un potencial ratchet.

Vemos que aunque el potencial sea asimétrico espacialmente la posición promedio se mantiene, con lo cual la velocidad media que se relaciona con la corriente de probabilidad (69), es cero.

El resultado de la simulación está de acuerdo con los cálculos realizados; graficando la ecuación (68) para diferentes fuerzas de inclinación  $F$  donde  $V$  es el potencial ratchet se obtiene (mediante una integración numérica [1])

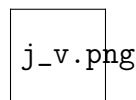


Figura 16: Velocidad promedio estacionaria vs. la fuerza de inclinación, obtenida a partir de (68),  $V_0 = 1/2\pi$  y  $D = 0,1$ .

lo cual confirma lo esperado, es decir, cuando se aplica el potencial ratchet en el equilibrio la velocidad media toma la misma dirección que la fuerza externa, en este caso  $F = 0$  por lo tanto  $\langle v \rangle = 0$ .

#### 5. Encendido y apagado del potencial ratchet.

Con los resultados anteriores se demuestra que con la aplicación del potencial ratchet no se logra obtener trabajo (la corriente neta de partículas es cero). Con el encendido y apagado del potencial se obtiene un fenómeno interesante y que abrirá camino para futuras aplicaciones.

Tomando como coeficiente de difusión  $D = 0,01$  se enciende y apaga el potencial con un periodo temporal de 0,5. Los resultados de la simulación se muestran en la siguiente figura

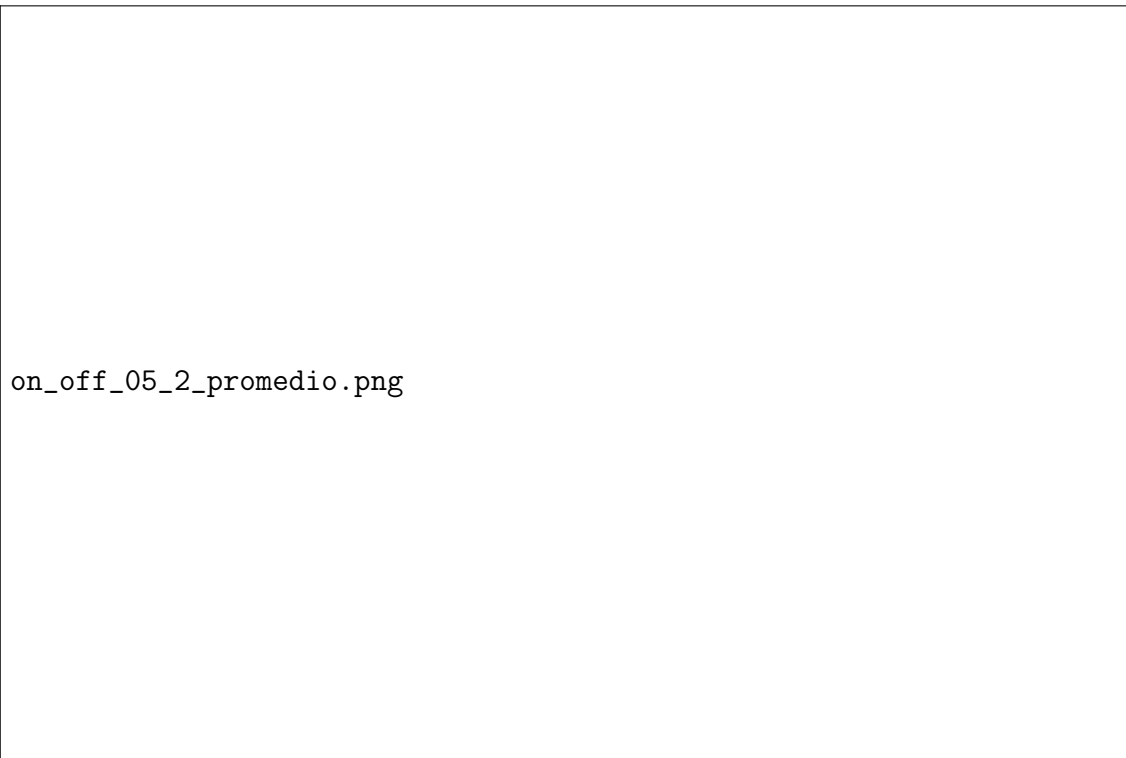
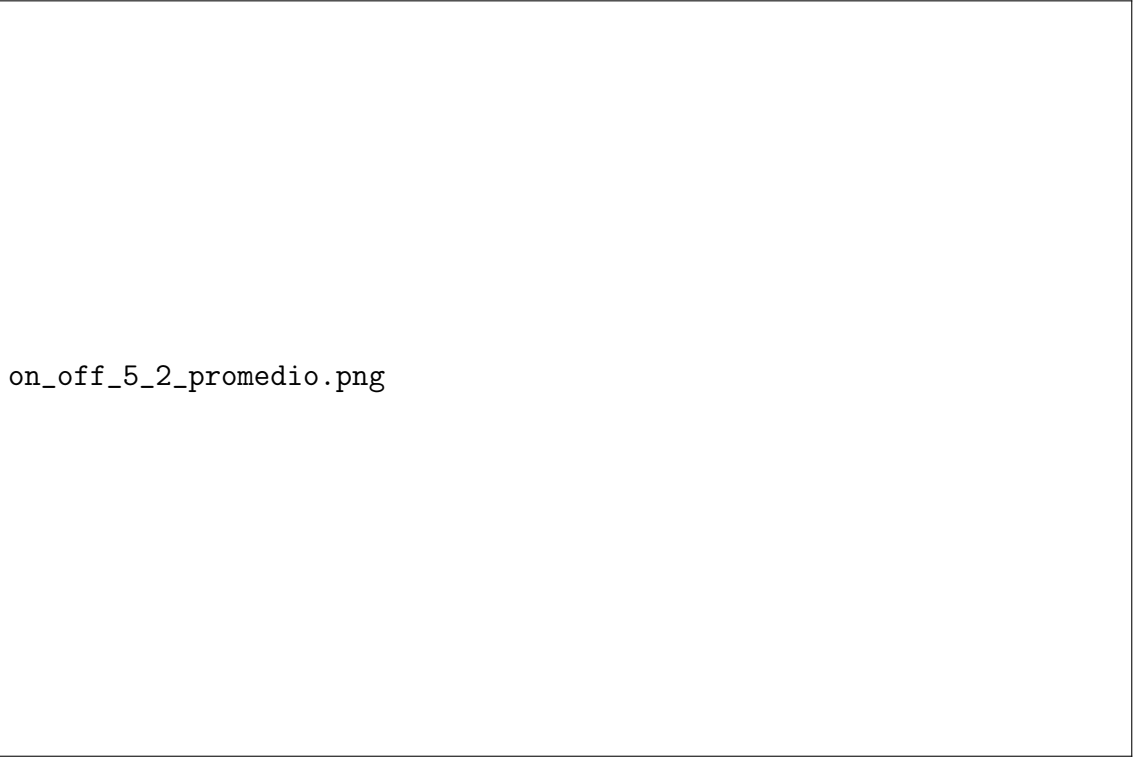


Figura 17: Comportamiento de 10 partículas cuando el ratchet se enciende y apaga en un periodo temporal de 0,5.

Se observa de la figura anterior regiones donde el potencial ratchet esta apagado y es donde unos pequeños saltos dentro del pozo de potencial se realizan. Las partículas no logran salir del pozo de potencial debido a que el tiempo de apagado no es lo suficientemente largo para que las partículas escapen de los pozos, o que el periodo espacial del potencial es lo suficientemente largo con lo cual los pozos de potencial cubren una mayor región.

Teniendo en cuenta el análisis del párrafo anterior se simula para un periodo temporal más prolongado de 5.





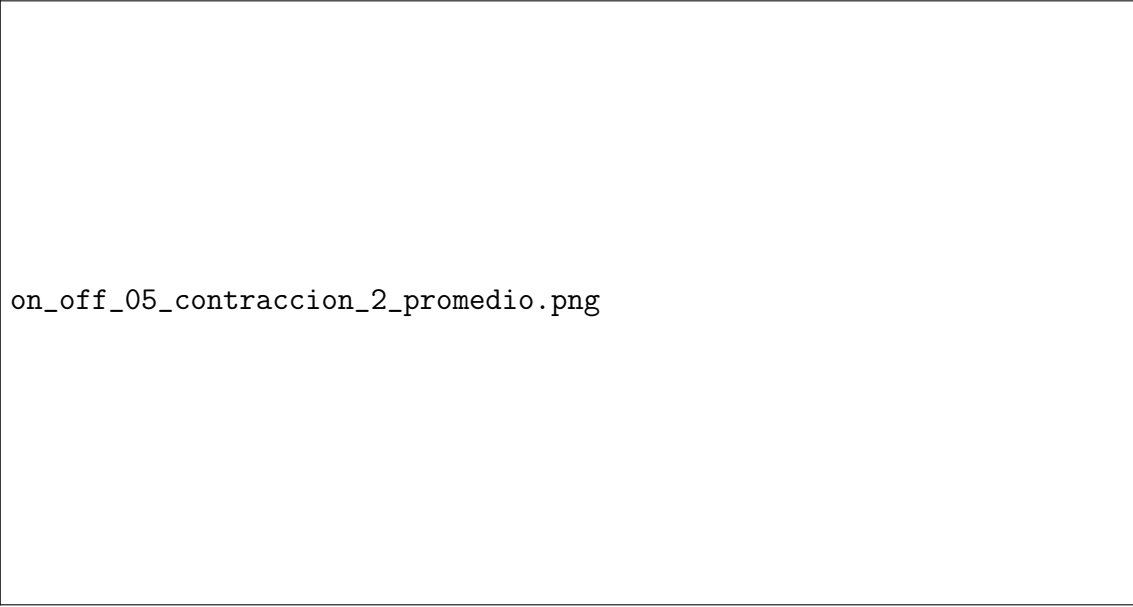
on\_off\_5\_2\_promedio.png

Figura 18: Comportamiento de 10 partículas cuando el ratchet se enciende y apaga en un periodo temporal de 5.

Es en la figura 18 donde se puede apreciar mejor lo mencionado anteriormente, además de que en esta simulación algunas partículas han escapado del pozo de potencial.

Para poder ver los efectos en un tiempo corto (en el eje horizontal se usa hasta  $t = 20$ ) se disminuye el periodo temporal del potencial ratchet. Si se disminuye el periodo espacial del potencial las partículas tendrán más probabilidad de escapar del pozo del potencial cuando el ratchet está apagado (ya que la región donde actúan los pozos disminuye), por lo tanto se tendría otra manera de liberar a las partículas de los pozos de potencial.


Disminuyendo el periodo espacial en un factor de 4 y para un periodo temporal de 0,2 se obtiene



on\_off\_05\_contraccion\_2\_promedio.png

Figura 19: Desplazamiento neto de las partículas al aplicar un potencial ratchet que se enciende y apaga.

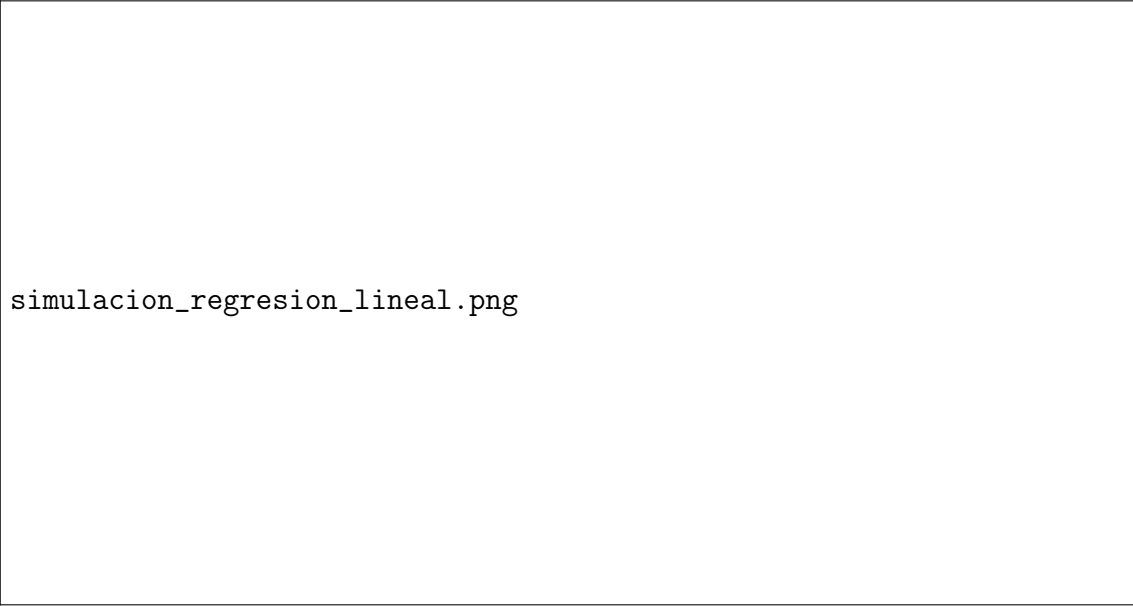
En la figura 19 se puede observar con mayor detalle el desplazamiento en promedio de las partículas, donde se aplicó un periodo de encendido y pagado de 0,2 y se disminuyo el periodo espacial a la cuarta parte del inicial. Los cambios realizados fueron favorables para que la partícula logre escapar de los pozos de potencial del ratchet, ya que debido a la propia asimetría del potencial ratchet la fuga de partículas no es igual en ambas direcciones. Como los picos del potencial más próximos a un pozo de potencial se encuentran hacia la derecha según la figura 9, las partículas tienen mayor probabilidad de ir hacia un pozo de potencial colocado hacia la derecha cuando el potencial se vuelve a encender. Lo mencionado se puede observar mejor en la figura 20 donde se muestra la distribución de probabilidad cuando se apaga el potencial.



distribucion\_apagado.png

Figura 20: La figura muestra como las partículas concentradas al inicio en un pozo de potencial (parte inferior de la figura) se distribuyen luego de que el potencial es apagado (parte superior de la figura), se observa que se obtiene una mayor probabilidad que se desplacen hacia la derecha ya que el pico de potencial se encuentra más próximo debido a la asimetría del potencial ratchet.

Realizando una regresion lineal sobre la posición media podriamos calcular mediante la pendiente la velocidad media




simulacion\_regresion\_lineal.png

Figura 21: Regresión realizada sobre la posición media de 10 partículas. La pendiente de la regresión es aproximadamente 0,0326.

Este fenómeno se denomina *efecto ratchet*, esta situación de apagar y encender no fue tratado analíticamente en la teoría, sin embargo se puede explicar ya que ha sido tema de discusión en las últimas décadas y de la cual se puede obtener información y explicar cualitativamente. Para la configuración de este tipo, los nombres de motor browniano, rectificador browniano, ratchet estocástico o simplemente ratchet son usados [12]. Debemos notar que en las variables de estado relevante en el sistema son  $x$  y  $T$ , en una ordinaria máquina térmica siempre circularían a través de la misma secuencia periódica de eventos, es decir, las variables de estado están estrechamente acoplados (entrelazados y sincronizados). Como consecuencia, un adecuado variable sería suficiente para describir al sistema. Por otro lado las variables del sistema de un genuino motor browniano son flojamente acoplados, es decir, mientras la temperatura  $T$  completa un ciclo, la posición podría  $x$  podría evolucionar de diferentes maneras ( $x$  no está esclavizado a  $T$ ).

## 6. Corriente de partículas para diferentes fuerzas.

Al aplicar fuerza en sentido contrario al desplazamiento producido se mantiene la dirección de desplazamiento (hasta cierto punto). Para observarlo se simula para diferentes magnitudes de fuerza constante (inclinación) sobre las 10 partículas



resultado.png

Figura 22: Se aplica diferentes fuerzas(no se toma en cuenta la fuerza producida por el potencial ratchet) sobre 10 partículas, además se realiza una regresión lineal sobre los resultados.

con lo cual se observa que aproximadamente a  $F = -0,05$ , la velocidad media es positiva. Este último detalle ha sido utilizado para explicar como a escala nano se podría realizar trabajo, ya que es en esta escala donde las fluctuaciones del medio toman mucha relevancia.

## VI. Futuros trabajos.

### 1. Motores moleculares.

Los *motores moleculares* son maquinas biológicas a escala microscópica capaces de consumir el combustible químico y convertirlo en trabajo mecánico. Existen diferentes tipos de motores proteicos(motores moleculares) entre las cuales están la *kinesin*, Myosin y el Dynein, ver figura 23. Para un primer acercamiento sobre los motores moleculares se estudia el caso del Kinesin [11].

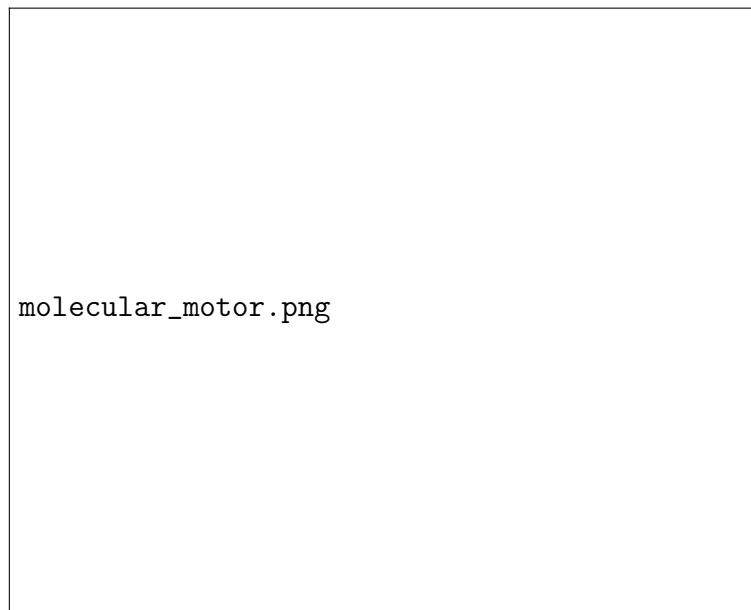


Figura 23: Figura de [15] donde se muestra a la Kinesin, Myosin y el Dynein transportándose a través de la interacción con el microtubo. Se observa que en el caso del Kinesin, este se dirige hacia fuera del núcleo.

El transporte activo en las células eucariotas es manejado por proteínas complejas como la Kinesin, la cual transporta una carga dentro de las células lejos del núcleo a lo largo de un microtubo transformando energía química(ATP) en trabajo mecánico para su desplazamiento.

La kinesin es una proteína formada por dos cadenas pesadas(que se entrecruzan en hélice y forma dos cabezas globulares), cada una de las cuales se une a una cadena ligera(neck) y la cola está unida a una carga o vesícula la cual es transportada, ver figura 24.

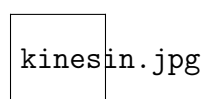


Figura 24: Descripción de las partes de un Kinesin.

El mecanismo de cómo se realiza este transporte es de gran interés en biología así como

en la biofísica. Dos mecanismos han sido propuestos, *inchworm* y *hand-over-hand* (ver figura 25), siendo este último el que mejor describe al Kinesin [11].

Para poder plantear el modelo primero debemos entender el proceso que se realiza: Las dos cabezas del Kinesin estan unidos al microtubo en dos monómeros vecinos hasta que un ATP es hidrolizado por la cabeza colocada en la parte de atrás, esta energía lo libera del tubo el cual se coloca hacia adelante y se une otra vez al tubo, lo mismo pasa con la otra cabeza una vez que la primera halla avanzado, el ciclo se repite logrando así un movimiento direccionado. Este movimiento hacia adelante se logra gracias al cuello y a la *busqueda difusional* basada en que el ruido asociado al baño térmico que rodea la partícula, hace que la partícula libre se mueva, este movimiento es preferentemente hacia adelante y forzado por la cabeza que esta unida al microtubo.

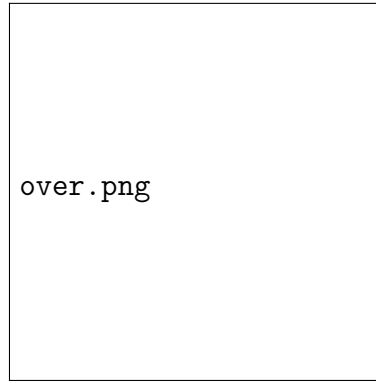


Figura 25: Se presenta una esquema de como se translada la Kinesin según el modelo *hand-over-hand* [11], en cada paso la Kinesin avanza  $2l_0$ ,  $l_0$  es el periodo del microtubo.

Las fluctuaciones térmicas juegan un rol importante en todo el proceso. En la escala nanométrica y en temperatura ambiente, el movimiento es gobernado por la aleatoriedad inducida por el ambiente (en este caso el cytosol, hecho principalmente por agua). En esta escala, el amortiguamiento y el ruido térmico son dominantes, y la dinámica puede ser estudiada por la ecuación de Langevin sobre-amortiguado, de la ecuación (80) en tres dimensiones:

$$m\gamma\dot{\vec{x}} = -\nabla V(\vec{r}) + \vec{F}(\vec{r}, t) + m\gamma\sqrt{2D}\vec{\xi}(t)$$

$$\langle \xi \rangle = 0, \quad \langle \xi_i(t)\xi_j(t') \rangle = \delta(t - t')\delta_{ij}$$

Para el planteamiento del potencial que puede explicar este transporte es necesario tener en cuenta las propiedades principales de los microtubos: Son regulares, periódicos y con polaridad estructural<sup>24</sup>.

Para modelar las características mencionadas se establece el siguiente potencial en una dimensión

$$V(x_1, x_2) = V_1(x_1, t) + V_2(x_2, t) + V_{12}(x_1 - x_2) \quad (89)$$

<sup>24</sup>Son asimétricos con respecto a sus dos extremos, los cuales determinan la dirección del movimiento del kinesin.

donde la unión de las dos cabezas es modelada por el potencial elástico  $V_{12}$ , [11]

$$V_{12}(d) = -\frac{1}{2}KR_0^2\ln(1 - \frac{(d - l_0)^2}{R_0^2}) \quad (90)$$

teniendo en cuenta las características del microtubo y el proceso al consumir ATP por el Kinesin(al consumir ATP se liberan las cabezas del microtubo), los potenciales  $V_i$  pudier ser modelados por

$$\begin{aligned} V_i(x, t) &= V_i(x)f(t) \\ V_1(x + 2l_0) &= V_1(x) = V_2(x + l_0) \end{aligned}$$

donde el potencial  $V_1$  tiene un periodo de  $2l_0$  y el potencial  $V_2$  esta desplazado  $l_0$  respecto a  $V_1$ . La dependencia espacial de los potenciales es forma de sierra, ver figura 26

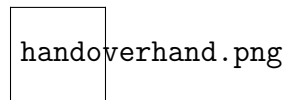


Figura 26: La forma de los potenciales  $V_i$  es forma de sierra,  $V_1$  es el de color azul y  $V_2$  es de color rojo. Los potenciales estan desplazados uno del otro por  $l_0$ , periodo del microtubo. Además se presenta 4 figura representado el encendido y apagado de cada potencial [11].

La función  $f(t)$  toma el valor de 0 cuando la cabeza consume ATP para liberarse(por lo tanto el potencial modelo  $V_1$  desaparece) y 1 cuando se vuelve a unir al microtubo(logrando así dar un paso hacia adelante). Esto ciclo de encender el potencial  $V_1$  y apagar  $V_2$  y visceversa durante un lapso de tiempo, es representado en la figura (26). Las cabezas del kinesin son colocados en pozos continuos de los potencial  $V_i$ , con lo cual al apagador un potencial(se consume ATP), este se libera y se coloca hacia adelante de la otra cabeza(cada potencial afecta solo a una cabeza), lo mismo pasa con la otra cabeza y así el ciclo se repite 27.

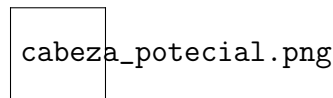


Figura 27: Esquema del mecanismo de transporte del Kinesin según el modelo planteado.

## VII. Conclusiones.

- Se comprobó las suposiciones realizadas por Einstein (5) y Langevin (9) al ser aplicadas sobre la ecuación de Langevin mediante las propiedades de las colisiones sobre las partículas brownianas, donde se obtiene la relación del desplazamiento cuadrático medio con el tiempo según la figura 6 para el movimiento browniano.
- Se simuló el movimiento browniano para un coeficiente de difusión  $D = 0,1$  en un lapso tiempo de  $t = 10$  dando como resultado una velocidad y posición promedio cero. Con ello se prueba que aunque en promedio las colisiones son 0, las partículas logran dispersarse debido a que la desviación estándar de la posición está relacionada con el tiempo transcurrido, mostrando así algunas propiedades de un proceso Wiener.
- Se estudió y simuló como afecta el potencial ratchet en la dispersión de las partículas brownianas para los coeficientes de difusión  $D = 1$  figura 12 ;  $D = 0,1$  figura 13 y  $D = 0,01$  figura 14, mostrando así su relación con la temperatura a través de la ecuación (39), donde la temperatura es directamente proporcional al coeficiente de difusión. Para el coeficiente de difusión  $D = 0,01$  se logró que las partículas se mantengan en los pozos de potencial del ratchet.
- De la solución de la ecuación de Fokker-Planck para procesos estacionarios con potenciales periódicos se simuló el caso para el potencial ratchet, el resultado fue que la velocidad promedio sigue siendo 0 para una fuerza de inclinación (externa) cero, figura 15 y 16, con lo cual muestra que aunque se presente asimetría espacial en el potencial, no se logra obtener corriente neta de partículas y por lo tanto el trabajo realizado es cero, no violando así la segunda ley de la termodinámica.
- Al encender y apagar el potencial ratchet se logró mostrar el fenómeno denominado *efecto ratchet* (no tratado matemáticamente en la teoría), según las simulaciones mostradas en las gráficas 17, 18 y 19 se obtuvo algunas características básicas del efecto ratchet como por ejemplo, que se debe tener un periodo temporal adecuado para que las partículas logren escapar de los pozos de potencial(al apagar el ratchet) y que para favorecer el desplazamiento se puede disminuir el periodo espacial del potencial ratchet.
- El efecto ratchet fue simulado para fuerzas en el rango de -0.05 a 0, obteniendo velocidades promedias positivas, con lo cual se obtiene trabajo realizado por las partículas. Un ejemplo fue para un cuarto del periodo espacial y un periodo temporal de 0.2 de encendido y apagado del potencial ratchet donde se obtuvo una velocidad promedio de 0,0326 para 10 partículas según la figura 21.
- El resultado del efecto ratchet fue extrapolado para explicar de manera aproximada el funcionamiento de los motores moleculares, en específico el del Kinesin, los cuales realizan trabajo trasladando una carga a través de microtubos dentro de una célula, mostrando además que en escala nano las fluctuaciones en el movimiento browniano son de gran importancia.



# Bibliografía

- [1] F. R. Alatríste. *Motores Brownianos: Transporte, Caos y Sincronización*. CopIt ArXives, 2007.
- [2] J. Bang, R. Pan, T. M. Hoang, J. Ahn, C. Jarzynski, H. Quan, and T. Li. Experimental realization of feynman’s ratchet. *New Journal of Physics*, 20(10):103032, 2018.
- [3] S. J. Blundell and K. M. Blundell. *Concepts in thermal physics*. Oup Oxford, 2009.
- [4] E. Butkov. *Mathematical Physics*. A-W series in advanced physics. Addison-Wesley Publishing Company, 1968.
- [5] W. Coffey and Y. P. Kalmykov. *The Langevin equation: with applications to stochastic problems in physics, chemistry and electrical engineering*, volume 27. World Scientific, 2012.
- [6] R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands. *The Feynman lectures on physics, Vol. I: The new millennium edition: mainly mechanics, radiation, and heat*, volume 1. Basic books, 2011.
- [7] C. W. Gardiner. *Stochastic Methods: A Handbook for the Natural and Social Sciences*. Springer., 2009.
- [8] M. Hoyuelos. *Introducción al no equilibrio*. Editorial Reverté, 2017.
- [9] B. Lau and O. Kedem. Electron ratchets: State of the field and future challenges. *The Journal of Chemical Physics*, 152(20):200901, 2020.
- [10] B. Lau, O. Kedem, J. Schwabacher, D. Kwasnieski, and E. A. Weiss. An introduction to ratchets in chemistry and biology. *Materials Horizons*, 4(3):310–318, 2017.
- [11] J. Munarriz, J. J. Mazo, and F. Falo. Model for hand-over-hand motion of molecular motors. *Physical Review E*, 77(3):031915, 2008.
- [12] P. Reimann and P. Hänggi. Introduction to the physics of brownian motors. *Applied Physics A*, 75(2):169–178, 2002.
- [13] A. Rex. Maxwell’s demon—a historical review. *Entropy*, 19(6):240, 2017.
- [14] S. R. Salinas. *Introducao á Física Estatística*. Editora da Universidade de Sao Paulo, 2005.
- [15] M. Schliwa and G. Woehlke. Molecular motors. *Nature*, 422(6933):759–765, 2003.