Potencial de Weierstrass

Antonio C., Braulio; Sevilla, Francisco J.

Departamento de sistemas complejos
Instituto de Física
Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM)
Septiembre 2017

Resumen

1. Introducción

Se propone estudiar los efectos de un potencial armónico con rugosidades sobre una partícula activa. Nos enfocaremos en el caso donde estas regularidades aparecen jerárquicamente en varias escalas. Para ello modelaremos las rugosidades con una función de Weierstrass truncada.

$$U(x) = \frac{1}{2}\epsilon\left(\frac{x}{L}\right)^2 + \alpha W_p(x) \tag{1.1}$$

Donde ϵ y α tienen unidades de energía y L de distancia. $W_p(x)$ es la función de Weierstrass truncada hasta $p+1$ elementos de la serie:

$$W_p(x) = \sum_{n=0}^{p} a^n \cos(b^n \pi \frac{x}{L}) \tag{1.2}$$

Donde $0 < a < 1$ y b es un entero impar positivo que cumple

$$ab > 1 + \frac{3}{2}\pi \tag{1.3}$$

Cuando $p \to \infty$ W_p es la función de Weierstrass, la cual es continua y no diferenciable en todo punto. Notemos que el escribir x/L en el argumento de la función W_p implica que a, b son escalares sin dimensión.

2. Características de la función de Weierstrass

Sabemos que $|\cos(b^n\pi x/L)| \leq 1$, por lo que $a^n|\cos(b^n\pi x/L)| \leq a^n$. Dado que a^n es menor estricto que 1, su convergencia está dada por la serie geométrica, de tal forma que al sumar sobre los valores de n:

$$-\frac{1-a^p}{1-a} \leq W_p(x) \leq \frac{1-a^p}{1-a} \tag{2.1}$$

Por lo que para toda x la amplitud de la función de Weierstrass está acotada.
En cuanto a la derivada de la función $W_p(x)$,

$$W_p'(x) = -\frac{\pi}{L}\sum_{n=0}^{p} a^n b^n \sin(b^n \pi \frac{x}{L}) \tag{2.2}$$

Conocemos su no convergencia cuando $p \to \infty$

3. Temperatura

Con el potencial dado, la temperatura efectiva asociada es

$$T(x) = T_0 \left[1 - \left(\frac{\mu}{v}\right)^2 U'(x)^2\right]$$

Donde $U'(x) = \epsilon x/L^2 + \alpha W_p'(x)$. Introduciendo en la temperatura

$$\frac{T(x)}{T_0} = 1 - \left(\frac{\mu\epsilon}{vL}\right)^2 \left(\frac{x}{L} + \frac{\alpha}{\epsilon} L W_p'(x)\right)^2$$

De manera que el análisis sea claro, definimos las cantidades adimencionales $g_1 = \mu\epsilon/(vL)$, $g_2 = \alpha/\epsilon$. Además establecemos las reglas de sustitución $T(x)/T_0 \to T(x)$, $x/L \to x$ y $LW_p(x) \to W_p(x)$, funciones igualmente adimencionales. De manera que obtenemos:

$$T(x) = 1 - g_1^2 \left(x + g_2 W_p'(x)\right)^2 \tag{3.1}$$

Nos limitaremos a trabajar con la región donde $T(x) \geq 0$. Para hallar dicha región en términos de los parámetros del problema, emplearemos la cota del seno,

$$\begin{aligned} -a^n b^n \leq& a^n b^n \sin(b^n \pi x) \leq a^n b^n \\ \Rightarrow -\sigma_p \pi \leq& W_p'(x) \leq \sigma_p \pi \\ \Rightarrow x - g_2 \sigma_p \pi \leq& x + g_2 W_p'(x) \leq x + g_2 \sigma_p \pi \end{aligned}$$

Donde $\sigma_p = \sum a^n b^n$. Por otro lado, buscar temperatura positiva $T(x) \geq 0$ implica $g_1^2 \left(x + g_2 W_p'(x)\right)^2$, lo cual se traduce a la desigualdad

$$-g_1^{-1} \leq x + g_2 W_p'(x) \leq g_1^{-1} \tag{3.2}$$

Es posible manipular las últimas dos cotas dadas para obtener la condición necesaria:

$$-g_1^{-1} + g_2 \sigma_p \pi \leq x \leq g_1^{-1} - g_2 \sigma_p \pi$$

O de manera compacta

$$|x| \leq \frac{1}{g_1} - g_2 \sigma_p \pi \tag{3.3}$$

Por lo que bajo estas condiciones, los parámetros g_1 y g_2 deben satisfacer

$$\frac{1}{g_1} \geq g_2 \sigma_p \pi \tag{3.4}$$

4. Potencial efectivo

El potencial efectivo antes de la regla de sustitución de la sección anterior es

$$\frac{U_{eff}(x)}{\epsilon} = \frac{1}{2}\left(\frac{x}{L}\right)^2 + \frac{\alpha}{\epsilon} W_p(x) + \frac{k_B T_0}{\epsilon}\left[1 - \left(\frac{\mu\epsilon}{vL}\right)^2 \left(\frac{x}{L} + \frac{\alpha}{\epsilon} L W_p'(x)\right)^2\right]$$

Notemos que es posible definir los mismos parámetros y reglas de sustitución que para la temperatura, con la inclusión de un tercer parámetro $g_3 = \epsilon/(k_B T_0)$ y sustitución $U_{eff}(x)/\epsilon \to U_{eff}(x)$:

$$U_{eff}(x) = \frac{1}{2} x^2 + g_2 W_p(x) + g_3^{-1}\left[1 - g_1^2 \left(x + g_2 W_p'(x)\right)^2\right] \tag{4.1}$$

Escribiendo la derivada del potencial efectivo adimensional

$$\begin{aligned} U_{eff}'(x) =& x + g_2 W_p'(x) - g_3^{-1} g_1^2 2 \left(x + g_2 W_p'(x)\right)\left(1 + g_2 W_p''(x)\right) \\ =& \left(x + g_2 W_p'(x)\right)\left[1 - g_3^{-1} g_1^2 \left(1 + g_2 W_p''(x)\right)\right] \end{aligned}$$

5. Máximos y mínimos de la distribución de probabilidad

Los argumentos donde la probabilidad se maximiza (modas) o minimiza, satisfacen

$$\begin{aligned}\frac{\partial P_{st}(x)}{\partial x} =& \frac{\partial}{\partial x} Z^{-1} \exp\left(-\int^{x} dx' \frac{U'_{eff}(x')}{k_B T(x')} \right) \\ =& - P_{st}(x) \frac{U'_{eff}(x)}{k_B T(x)} = 0\end{aligned}$$

Sabemos de antemano que los argumentos tales que $P_{st}(x) = 0$ son mínimos. Los máximos pueden ocurrir si $T(x) \to \pm\infty$ o $U'_{eff}(x) = 0$. Dado que la temperatura solo puede divergir a $-\infty$, cuya solución no nos interesa, pasaremos al segundo caso.

$$U'_{eff}(x) = \left(x + g_2 W'_p(x)\right) \left[1 - g_3^{-1} g_1^2 \left(1 + g_2 W''_p(x)\right)\right] = 0$$

Problema que podemos descomponer en dos casos, $g_2 W'_p(x) = -x$ y $g_2 W''_p(x) = g_1^{-2} g_3 - 1$

5.1. Caso 1

Nuevamente es posible explotar la cota del seno para obtener

$$|x| \leq \pi g_2 \sigma_p$$

Por lo que buscamos raíces en el intervalo I tal que tiene límites simétricos respecto al cero: $\text{mín}\{g_1^{-1} - g_2\sigma_p\pi, g_2\sigma_p\pi\}$. Notemos además, que $x = 0$ siempre es solución.

Es de interés averiguar si existen parámetros $\{g_i\}$ tales que no exista más que un mínimo en $x = 0$. Es claro que aparecerán varios máximos locales con la presencia de la rugosidad, la pregunta es si es posible mitigar dichos efectos mediante la selección adecuada de parámetros. Para no tener ceros debe cumplirse simultáneamente

$$\begin{aligned} g_2 W'_p(x) < -x \text{ si } x < 0 \\ g_2 W'_p(x) > -x \text{ si } x > 0 \end{aligned}$$

Primero notemos que la primera desigualdad implica la segunda. Supongamos que $x < 0$ y $g_2 W'_p(x) < -x$, haciendo $x = -y$, $-y < 0$, es decir $y > 0$ y $g_2 W'_p(-y) < -(-y) = y$, pero $W'_p(x)$ es impar, de manera que $-g_2 W'_p(y) < y \Rightarrow g_2 W'_p(y) > -y$.

Para cumplir la primera desigualdad debe cumplirse que $g_2 |W'_p(x)| < \text{mín}\{g_1^{-1} - g_2\sigma_p\pi, g_2\sigma_p\pi\}$. La derivada está acotada por $|W'_p(x)| \leq \pi\sigma_p$, por lo que es posible hallar dos condiciones necesarias:

$$\begin{aligned} g_2\pi\sigma_p < g_2\pi\sigma_p \text{ si } \text{mín} = g_2\sigma_p\pi \ ! \\ g_2\pi\sigma_p < g_1^{-1} - g_2\sigma_p\pi \text{ si } \text{mín} = g_1^{-1} - g_2\sigma_p\pi \ ! \end{aligned}$$

Por lo cual no existe combinación de parámetros para los cuales no haya máximos en la distribución de probabilidad provenientes de los mínimos de $W_p(x)$. Es decir, no es posible *apagar* los efectos de las rugosidades.

5.2. Caso 2

Este caso 2 es sin duda interesante, ya que el lado derecho de la ecuación es constante. Esto nos dice que la existencia de las soluciones depende enteramente de la relación entre los factores g_i.

$$g_2^{-1}(1 - g_1^{-2} g_3) = \sum_{n=0}^{p} \pi^2 a^n b^{2n} \cos(b^n \pi x)$$

Nuevamente, la suma en cuestión está acotada por $|\sum \pi^2 a^n b^{2n} \cos(b^n \pi x)| \leq \zeta_p$ donde $\zeta_p = \sum \pi^2 a^n b^{2n}$. Una condición para la no existencia de raíces es que

$$g_2^{-1}(1 - g_1^{-2} g_3) > \zeta_p$$

Esto exige que $1 > g_1^{-2} g_3$, es decir $g_1 > \sqrt{g_3}$ y además $g_2 < (1 - g_1^{-2} g_3)/\zeta_p$. Dejando como parámetro libre g_3 siempre es posible constreñir g_1 y g_2 de manera que se satisfaga:

$$g_1 > \sqrt{g_3} \tag{5.1}$$

$$g_2 < \text{mín}\left\{\frac{1}{g_1\sigma_p\pi}, \frac{1 - g_1^{-2}g_3}{\zeta_p}\right\} \tag{5.2}$$

De manera que sí es posible atenuar estos máximos o mínimos en $P_{st}(x)$.

6. Comentarios

En el caso del potencial armónico liso, se pueden encontrar valores en los parámetros del problema que son capaces de realizar una transición unimodal $\rightarrow$ uniforme $\rightarrow$ bimodal. No hemos probado que en efecto no existen estas transiciones a gran escala; sin embargo, se ha mostrado que localmente los efectos de la rugosidad se traducen en mínimos (y necesariamente máximos) locales que persisten a pesar de la elección de los parámetros.

Por otra parte, una vez establecido un dominio finito I, vale la pena averiguar cuál es el comportamiento de P_{st} en el dominio de sus componentes frecuenciales, ya que el potencial empleado es esencialmente una suma finita de frecuencias (Weierstrass, funciones coseno) sobre una función que puede ser descompuesta igualmente en frecuencias (nuevamente, funciones coseno).

Además, también es de interés analizar el caso donde no es el potencial sino su derivada la función que se comporta como Weierstrass. Esto con el fin de que tanto la derivada del potencial efectivo como la temperatura se encuentren acotados dentro de un intervalo que no varía con la adición de términos $p \rightarrow$ sino que está a priori determinado por sus parámetros a y b.