

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA - UNIDAD  
IZTAPALAPA

DEPARTAMENTO DE FÍSICA



---

**ROBOTS HEXBUG-NANO ATRAPADOS Y UN  
SISTEMA DE MATERIA ACTIVA INERCIAL CON  
PROPULSIÓN DEPENDIENTE DEL TIEMPO**

---

TESIS QUE PRESENTA:  
FÍS. LUIS LORENZO GUTIERREZ MARTINEZ  
PARA OBTENER EL GRADO DE MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)

ASESOR:

DR. MARIO SANDOVAL ESPINOZA

JURADO CALIFICADOR:

DR. MARIO SANDOVAL ESPINOZA

DR. RODRIGO ANTONIO SOTO BERTRAN

DR. FERNANDO MIGUEL PERUANI SAN ROMÁN

CIUDAD DE MÉXICO

ENERO DEL 2022



# Dedicatoria

*Es mi más grato sentir dedicar este trabajo a mis padres como una muestra de que todo su esfuerzo invertido en apoyarme con mis estudios ha dado frutos, a mi hermana Diana Lucia Gutierrez y a todos mis familiares jóvenes, con la esperanza de que se motiven a continuar sus estudios y que logren alcanzar sus propias metas.*



# Agradecimientos

Quiero agradecer principalmente a mis padres Fortino Gutierrez Vargas y Mayola Martinez Suarez por el apoyo económico y moral que me han brindado en todo este tiempo, a pesar de las dificultades que hemos tenido que atravesar. En segunda instancia agradezco a mi asesor el Dr. Mario Sandoval Espinoza por ser mi guía en el fascinante mundo de la ciencia, por su enorme paciencia y la confianza que ha depositado en mí. Agradezco a mi amigo y colega Pedro Emilio Herrera por su compañía en esta aventura y sus llamadas de atención. También agradezco a mi amigo y compañero de entrenamiento Mario Alberto Hernández por animarme a llevar una vida más saludable y brindarme su amistad. Dirijo un agradecimiento especial al Dr. Luis Mier y Terán Casanueva por hacer un espacio en su tiempo, escuchar mis inquietudes y brindarme su consejo, cada vez que se lo solicitaba.



# Resumen

El estudio de materia activa, en los últimos años, se ha vuelto un campo de estudio muy prometedor por la información que ha brindado sobre los fenómenos que ocurren en sistemas biológicos y artificiales fuera de equilibrio, y por sus posibles aplicaciones. En la mayoría de los trabajos reportados hasta ahora sobre materia activa, se descuida la inercia y se asume que la velocidad de autopropulsión de partículas activas es constante, por lo que estudiar los efectos de la inercia en estos sistemas puede arrojar información nueva y relevante para este campo. Los objetivos principales que se tuvieron en esta tesis fueron proponer un modelo para caracterizar robots hexbug-nano atrapados en una antena parabólica con aspereza añadida y a partir de este modelo calcular cantidades estadísticas que coincidieran con lo observado en el experimento. Otro de los objetivos principales fue proponer un modelo matemático más general para sistemas de materia activa inerciales sin interacción con una velocidad de propulsión dependiente del tiempo y encontrar el desplazamiento cuadrático medio para este sistema.

El presente trabajo se divide en dos partes los cuales abordan sistemas de materia activa con inercia y que no interactúan entre sí. En la primera parte caracterizamos la difusión, la rapidez cuadrática media, el desplazamiento angular cuadrático medio, las distribuciones de probabilidad radial y de velocidad de los robots de juguete llamados "hexbugs-nano" que se mueven sobre una antena parabólica (con rugosidad superficial añadida) simulando un pozo armónico. Se observa que un modelo que considere la inercia traslacional del sistema, pero descuidando su momento de inercia, junto con la inclusión de una torca externa constante en el movimiento de orientación, es suficiente para describir la dinámica de los robots. También se realizan simulaciones de dinámica de Langevin y se observa una buena concordancia entre teoría, simulaciones y experimentos.

Para la segunda parte proponemos un modelo en el que las partículas activas tienen una inercia no despreciable (masa y momento de inercia) y una velocidad de propulsión periódica dependiente del tiempo. Estudiamos la propulsión más general utilizando la serie de Fourier y abordamos tres casos particulares, el primero es cuando la velocidad es una función sinusoidal, el segundo es una función de onda cuadrada y el tercero es una función en zigzag. El efecto de la inercia y la propulsión dependiente del tiempo sobre el desplazamiento cuadrático medio del sistema se encuentra teóricamente siguiendo un formalismo de Langevin.

Los objetivos para el sistema experimental de los hexbugs-nano fueron alcanzados, ya que se lograron obtener resultados teóricos que coinciden en buena medida con lo

observado en el experimento, sin embargo, aún queda la posibilidad de mejorar este modelo. En cuanto al modelo más general que considera una velocidad de propulsión periódica, si fue posible obtener una expresión teórica del desplazamiento cuadrático medió, el cual sugiere que el sistema tiene una difusión normal sin importar que tipo de función describa la velocidad de propulsión, siempre y cuando sea periódica.

---



# Abstract

The study of active matter, in recent years, has become a very promising field of study due to the information it has provided on the phenomena that occur in non-equilibrium biological and artificial systems, and for its possible applications. In most of the works reported so far on active matter, inertia is neglected and it is assumed that the self-propulsion speed of active particles is constant, so studying the effects of inertia in these systems can yield new and relevant information for this field. The main goals of this thesis were to propose a model to characterize hexbug-nano robots trapped in a parabolic antenna with added roughness and from this model calculate statistical quantities that coincide with what was observed in the experiment. Another main goal was to propose a more general mathematical model for non-interacting inertial active matter systems with time-dependent propulsion speed and to find the mean square displacement (MSD) for this system.

The present work is divided into two parts which address active matter systems with inertia and that do not interact with each other. In the first part we characterise the diffusion, mean-square speed, mean-square angular displacement, radial and speed probability distributions of toy robots called 'hexbugsnano' that move on a dish antenna (with added surface roughness) simulating a harmonic well. It is observed that a model considering the system's translational inertia but neglecting its moment of inertia, together with the inclusion of a constant external torque in the orientational motion, suffices to describe the robots' dynamics. Langevin dynamics simulation are also performed and a good agreement between theory, simulations and experiments is observed.

For the second part we propose a model in which active particles have nonnegligible inertia (mass and moment of inertia) and a time-dependent periodic propulsion speed. We study the most general propulsion using Fourier series and address three particular cases, the first is when the speed is a sine function, the second is a square wave function and the third is a zigzag function. The effect of inertia and time-dependent propulsion on the system's mean-square displacement, is found theoretically following a Langevin formalism.

The goals for the experimental system of hexbugs-nano were achieved, since it was possible to get theoretical results that largely coincide with what was observed in the experiment, however, there is still the possibility of improving this model. As for the more general model that considers a periodic propulsion speed, if it was possible to get a theoretical expression of the mean square displacement (MSD), which suggests that the system has a normal diffusion regardless of what type of function describes

the propulsion speed, as long as when it is periodic.

---

# Índice general

Índice de figuras	1
<b>1. Presentación</b>	<b>5</b>
1.1. Objetivos	5
1.2. Plan de tesis	6
<b>2. Marco teórico</b>	<b>7</b>
2.1. Movimiento browniano	7
2.1.1. Teorema de equipartición	7
2.1.2. Ruido blanco	10
2.1.3. Ecuación de Langevin	10
2.1.4. Difusión efectiva	12
2.2. Movimiento browniano activo	14
2.2.1. La materia activa	14
2.2.2. Partícula browniana activa libre	17
2.2.3. Partícula browniana activa en una trampa armónica	21
<b>3. Robots hexbug-nano activos atrapados: teoría y experimento</b>	<b>27</b>
3.1. Introducción	27
3.2. Experimento	29
3.3. Caracterización	34
3.3.1. Ecuaciones de movimiento	34
3.3.2. Solución a las ecuaciones de movimiento	36
3.3.3. MSD y MSS del sistema	40
3.4. Funciones de distribución de probabilidad radial y de velocidad	46
<b>4. Materia activa inercial con propulsión periódica</b>	<b>49</b>
4.1. Introducción	49
4.2. Modelo teórico	51
4.2.1. Ecuación traslacional	52
4.2.2. Ecuación rotacional	54
4.3. Solución a las ecuaciones de movimiento	56
4.4. Desplazamiento cuadrático medio	58
4.4.1. Velocidad de propulsión periódica	64

---

4.4.2. Tratamiento matemático . . . . .	67
4.5. Casos particulares . . . . .	73
4.5.1. Velocidad de propulsión tipo coseno . . . . .	73
4.5.2. Velocidad de propulsión tipo onda cuadrada . . . . .	74
4.5.3. Velocidad de propulsión tipo zigzag . . . . .	77
<b>5. Conclusiones</b>	<b>83</b>
5.1. Robots hexbug-nano activos atrapados . . . . .	83
5.2. Materia activa inercial con propulsión periódica . . . . .	84
5.3. Artículo derivado de tesis . . . . .	86
<b>6. Apéndice</b>	<b>87</b>

# Índice de figuras

2.1.	Se presenta una galería de imágenes relacionadas con el comportamiento colectivo. Entre otros, ilustra la posible existencia de patrones de comportamiento muy generales. (a) Langostas sin alas marchando en el campo. (b) Una colonia rotatoria de hormigas armadas. (c) Una matriz tridimensional de rayos dorados. (d) Se sabe que los peces producen tales vórtices. (e) Antes de posarse, miles de estorninos producen una fascinante exhibición aérea. También están tratando de evitar un ave depredadora cerca de la estructura central en forma de dedo. (f) Una manada de cebras. (g) Personas ordenadas espontáneamente en “carriles de tráfico” cuando cruzan un puente peatonal en grandes cantidades. (h) Aunque se sabe que las ovejas se mueven de manera muy coherente, tal como predice la teoría correspondiente, cuando simplemente están merodeando (sin movimiento), no pueden surgir patrones de orientación bien desarrollados [1]. . . . .	15
2.2.	Esquema de una partícula activa que toma energía de su entorno y mediante un proceso interno lo transforma en movimiento dirigido. . . . .	16
3.1.	Imagen de un robot hexbug-nano [2], en la figura se puede observar las patas con las que el robot se propulsa cuando este es encendido. . . . .	28
3.2.	De izquierda a derecha y en el sentido de las agujas del reloj, esquema de la configuración experimental, una vista trasera de un hexbug mostrando sus dos patas traseras, claramente una es más delgada; y una foto del robot hexbug-nano sobre la antena en donde se puede observar la aspereza añadida. . . . .	29
3.3.	(a) Rutas típicas de seis realizaciones numéricas durante 2.4 segundos. Los vectores de velocidad y orientación para el caso de la trayectoria negra se muestran con flechas azul claro y verde claro, respectivamente. (b), Caminos típicos de siete realizaciones experimentales durante 2.4 segundos. Las posiciones iniciales en ambas figuras se muestran con un punto verde claro y las posiciones finales con un punto naranja. . . . .	30

3.4.	(a), Medición experimental del ángulo medio en función del tiempo en 100 realizaciones (círculos azules). Se presenta el modelo rotacional añadiendo una torca constante (línea discontinua naranja) y simulaciones del modelo rotacional autoalineable [3] (círculos negros). Recuadro: Misma medida sin escala logarítmica. (b), Medición experimental del desplazamiento angular cuadrático medio sobre 100 realizaciones (círculos azules). Se muestra el modelo rotacional añadiendo una torca constante (línea discontinua naranja) y simulaciones del modelo rotacional autoalineable [3] (círculos negros). Recuadro: Misma medida sin escala logarítmica. . . . .	31
3.5.	Imagen de hexbug-nano con la ubicación de sus componentes principales y de su vector director. En la misma figura también se puede observar el ángulo de orientación $\varphi$ . . . . .	32
3.6.	Recuadro superior izquierdo: Esquema de un experimento en el que un hexbug se cuelga utilizando un hilo para observar el giro del bug, que resultó ser en sentido contrario al giro del motor. El esquema grande representa el experimento visto desde el suelo que puede intuirse por los ejes coordenados. . . . .	33
3.7.	Desplazamiento cuadrático medio (MSD) y velocidad cuadrática media (MSS) para robots hexbugs en una antena parabólica con rugosidad adicional. (a) MSD de Hexbugs, experimento (círculos azules), teoría dada por la Ec. (3.52) (líneas discontinuas verdes) y las simulaciones (línea discontinua naranja) coinciden completamente. El error experimental se muestra como un símbolo de error azul claro. (b) Medición de MSS de Hexbugs, experimento (círculos azules), teoría dada por la Ec. (3.56) (líneas discontinuas verdes) y las simulaciones (línea discontinua naranja) tienen una buena concordancia. Esta teoría del tiempo y las simulaciones caen dentro del margen de error experimental en tiempos prolongados (símbolo de error azul claro). . . . .	45
3.8.	(a) Función de distribución de probabilidad radial estable numérica y experimental para $N = 100$ realizaciones y $N = 2000$ realizaciones, respectivamente. (b) Función de distribución de probabilidad de velocidad constante numérica y experimental para $N = 100$ realizaciones y $N = 2000$ realizaciones, respectivamente. Recuadro: función de distribución de probabilidad constante para la componente $x$ del vector de velocidad. . . . .	46
3.9.	Ensamble de velocidad promedio, $\bar{v}$ , para tres hexbugs, y el efecto del número de realizaciones en él. . . . .	47
4.1.	Esquema del modelo propuesto. La partícula estocástica activa inercial (círculo verde) de masa $M$ e inercia rotacional $I$ , está sujeta a fuerzas y torcas estocásticas ( $\tilde{\mathbf{f}}$ y $\tilde{g}$ ). Su vector de propulsión ( $U(t)\mathbf{e}(t)$ ) con dirección aleatoria $\theta$ se indica como una flecha amarilla. . . . .	52
4.2.	Estos son algunos ejemplos de funciones periódicas. . . . .	53

4.3. Esquema del movimiento rotacional del disco. . . . .	55
4.4. Gráfica de velocidad de propulsión sinusoidal contra el tiempo, donde $U_T$ , $U_0$ y $\alpha$ son parámetros que dependen del caso particular que se desee estudiar. . . . .	58
4.5. Gráfica de velocidad de propulsión tipo coseno vs tiempo con $T = 4$ s y $U_0 = 1$ m/s. . . . .	74
4.6. Gráfica de velocidad de propulsión tipo onda cuadrada vs tiempo con $T = 4$ s y $U_0 = 1$ m/s. . . . .	75
4.7. Superposición de la función onda cuadrada y la función obtenida con $N = 5$ en la serie de Fourier. . . . .	75
4.8. Superposición de la función onda cuadrada y la función obtenida con $N = 30$ en la serie de Fourier. . . . .	76
4.9. Gráfica de velocidad de propulsión tipo zigzag vs tiempo con $T = 4$ s y $U_0 = 1$ m/s. . . . .	78
4.10. Superposición de la velocidad de propulsión tipo zigzag con la serie de Fourier con $N = 2$ . . . . .	78
4.11. Superposición de la velocidad de propulsión tipo zigzag con la serie de Fourier con $N = 15$ . . . . .	78
4.12. Comparación del MSD para tres velocidades de propulsión distintas de partículas estocásticas inerciales que no interactúan. La línea continua roja corresponde al caso sobreamortiguado en el que la velocidad de propulsión es nula ( $U = 0$ ), la línea continua verde claro corresponde a una velocidad de propulsión recíproca ( $U = U_0 \cos \omega t$ ) y la línea continua amarilla corresponde al caso más común que es el de una velocidad de propulsión constante ( $U = U_0$ ). Los datos utilizados para realizar la gráfica fueron $U_0=0.093$ m/s, $M = 4 \times 10^{-3}$ kg, $I=1.46 \times 10^{-7}$ kgm <sup>2</sup> , $D_T=7.7 \times 10^{-5}$ m <sup>2</sup> /s, $D_\Omega=2.7$ s <sup>-1</sup> , $\tau_I=0.194$ s y para el caso de la velocidad recíproca $T = 4$ s, la mayoría de estos datos se obtuvieron de los experimentos de Scholz [4] sobre vibrobots (sistema experimental de partículas activas inerciales). . . . .	79
4.13. Desplazamiento cuadrático medio (MSD) de un sistema de partículas activas inerciales que no interactúan con velocidad de propulsión recíproca ( $U = U_0 \cos \omega t$ ) para diferentes valores del número de Stokes rotacional, $S_R = \{0.13, 0.52, 2.62\}$ . Los datos utilizados para realizar el gráfico fueron tomados nuevamente de los experimentos de Scholz [4] y lo que se varió fue la masa ( $M$ ). Esta figura muestra que la difusividad aumenta a medida que aumenta la inercia ya que esta es proporcional al número de Stokes rotacional ( $S_R \propto M$ ). . . . .	80
4.14. Tabla de las masas que se utilizaron para la gráfica de la Fig. 4.13, con los valores correspondientes a $\tau_I$ y $S_R$ , ya que estos son proporcionales a la masa ( $M$ ). La masa intermedia $M = 0.004$ Kg es la que corresponde al vibrobot de Scholz [4], la cual se varió disminuyendo y aumentando su valor, obteniendo así los otros dos números de Stokes rotacionales ( $S_R$ ). . . . .	81





# Capítulo 1

## Presentación

El desarrollo de esta tesis está motivado por el interés actual que tienen los campos de la biotecnología y la robótica en el estudio de la materia activa a escalas macroscópicas utilizando herramientas de física estadística y computacionales. Originalmente solo se tenía un tema de estudio para esta tesis, pero en el transcurso de su desarrollo se abrió otro camino para el estudio de otro tema independiente de este, pero que también entra en el interés de los campos antes mencionados. El estudio específico en esta investigación corresponde a estudiar partículas activas inerciales naturales y artificiales bajo condiciones específicas. Esta tesis se divide en dos partes, en la primera se estudia un sistema de partículas activas con inercia traslacional, sin interacción y con una torca intrínseca, este estudio se hace de forma experimental, teórica y numérica. La segunda investigación consiste en proponer un modelo matemático para partículas estocásticas activas inerciales no interactivas con velocidad de propulsión dependiente del tiempo. Dada la naturaleza diferente de cada tema y debido a que cada uno corresponde a un capítulo de esta tesis, cada capítulo comienza con sus antecedentes específicos.

En esta presentación de tesis se incluye los objetivos que se plantearon al iniciar esta investigación, en los que se menciona el objetivo general y específico para cada uno de los dos temas de investigación que se abordaron. También se presenta una descripción breve del contenido para cada uno de los capítulos.

### 1.1. Objetivos

El objetivo general de esta tesis fue estudiar dos sistemas de materia activa inerciales sin interacción con el fin de caracterizar sus propiedades de transporte de manera teórica, numérica y experimental. Los objetivos de forma más particular para cada uno de los sistemas son los siguientes,

1. Realizar un experimento con robots hexbug-nano atrapados en una antena parabólica con rugosidad añadida y proponer un modelo matemático de partículas activas con inercia traslacional y con una torca externa constante, partiendo de

este modelo se pretende calcular cantidades estadísticas para caracterizar el sistema experimental.

2. Proponer un modelo matemático para un sistema de partículas estocásticas activas inerciales sin interacción y con una velocidad de propulsión periódica en el tiempo, posteriormente plantear las ecuaciones de movimiento de este sistema y calcular el desplazamiento cuadrático medio o MSD (por sus siglas en inglés) para el caso más general y algunos casos particulares.

## 1.2. Plan de tesis

**Capítulo 2:** Este capítulo corresponde al marco teórico utilizado en esta tesis, lo primero que se muestra son algunos resultados conocidos de la teoría del movimiento browniano, después se hace una breve introducción sobre la materia activa y se presentan algunos resultados, específicamente se recopilan resultados actuales sobre la dinámica de partículas autopropulsadas con inercia despreciable.

**Capítulo 3:** En este capítulo se describe el experimento de robots hexbug-nano atrapados en una antena parabólica, el cual simula una trampa armónica, se propone un modelo matemático para caracterizar el sistema experimental planteando las ecuaciones de movimiento y calculando su desplazamiento cuadrático medio (MSD), rapidez cuadrática media (MSS por sus siglas en inglés), el desplazamiento angular cuadrático medio (MSAD por sus siglas en inglés), las distribuciones de probabilidad radial y de velocidad de los robots. También se incluyen resultados numéricos que se obtienen de realizar simulaciones de dinámica de Langevin.

**Capítulo 4:** Se propone un modelo matemático para sistemas de materia activa completamente inerciales (con masa y momento de inercia) que no interactúan entre sí y que cuentan con una velocidad de propulsión periódica en el tiempo. El capítulo se divide en distintas secciones, en una se plantean las ecuaciones de movimiento para la parte traslacional y rotacional, en otra se resuelven estas ecuaciones, posteriormente se calcula el desplazamiento cuadrático medio para el caso más general y para tres casos particulares.

**Capítulo 5:** Se presentan las conclusiones y recomendaciones para los dos temas de investigación que se trabajaron en esta tesis, esto en función de los objetivos planteados y los resultados obtenidos para cada caso.

**Capítulo 6:** Como último capítulo se presentan los apéndices, la incorporación de este capítulo a esta tesis se realizó con el fin de mejorar la comprensión de los temas. En estos apéndices se incluyen resultados complementarios y procedimientos meramente matemáticos, como la resolución de integrales estocásticas, cálculos de números complejos y de coeficientes de Fourier.

# Capítulo 2

## Marco teórico

### 2.1. Movimiento browniano

La teoría del movimiento browniano es uno de los logros más importantes que surgieron a principios del siglo XX, cuya formulación teórica fue hecha por Albert Einstein. Esta junto a otras teorías como la mecánica cuántica y la relatividad dieron origen a grandes avances científicos que aun hoy en día siguen aportando información acerca de cómo funciona nuestro entorno, de que está conformado y como se pueden manipular para que tengan aplicaciones. La importancia del movimiento browniano también se debe a sus aplicaciones en varios campos de estudio, como es la teoría de circuitos eléctricos, láseres y en particular a servido como base teórica para el estudio de la materia activa. En esta sección no se pretende abordar o explicar a fondo la teoría del movimiento browniano ni dar antecedentes históricos acerca de su evolución como teoría, debido a que en sí no es nuestro tema de estudio, aun así se presentan algunos teoremas y conceptos importantes que son la base del estudio del movimiento de partículas activas. Se presenta el formalismo de Langevin en la forma que se trabaja actualmente para obtener las cantidades estadísticas sin abordar el tema en sí.

#### 2.1.1. Teorema de equipartición

Cualquier sistema descrito clásicamente en función de  $f$  coordenadas  $q_1, \dots, q_f$  y  $f$  cantidades de movimiento correspondientes  $p_1, \dots, p_f$ . Su energía  $E$  está en función de estas variables y con frecuencia esta energía presenta la forma siguiente

$$E = \epsilon_i(p_i) + E(q_1, \dots, q_f) \quad (2.1)$$

en donde  $\epsilon_i$  es una función del momento particular  $p_i$  y  $E$  es una función de todas las coordenadas y momentos excepto  $p_i$  (un ejemplo es cuando la energía total es la suma de la energía cinética más la energía potencial, y se tiene que la primera solo dependa de los momentos y el segundo solo dependa de las coordenadas). Suponemos que el sistema considerado está en equilibrio térmico con un reservorio de calor a temperatura  $T$ .

Por definición, el valor de la función  $\epsilon_i$  se obtiene haciendo la suma (o integral) apropiada sobre todos los estados posibles del sistema, es decir

$$\langle \epsilon_i \rangle = \int \epsilon_i P(x) dq_1 \cdots dp_f$$

donde  $P(x)$  es la distribución canónica

$$P(x) = \frac{e^{-\beta E}}{\int e^{-\beta E} d\phi}$$

en donde  $d\phi = dq_1 \cdots dp_f$ , por lo que

$$\langle \epsilon_i \rangle = \frac{\int \epsilon_i e^{-\beta E(q_1, \dots, p_f)} dq_1 \cdots dp_f}{\int e^{-\beta E(q_1, \dots, p_f)} dq_1 \cdots dp_f}$$

La integral se extiende a todos los valores posibles tanto de coordenadas  $q_i, \dots, q_f$  como de momentos  $p_i, \dots, p_f$ . Utilizando la ecuación (2.1) y usando la propiedad multiplicativa de las exponenciales se tiene.

$$\begin{aligned} \langle \epsilon_i \rangle &= \frac{\int e^{-\beta(\epsilon_i + E)} \epsilon_i dq_1 \cdots dp_f}{\int e^{-\beta(\epsilon_i + E)} dq_1 \cdots dp_f} \\ &= \frac{\int e^{-\beta_i \epsilon_i} \epsilon_i dp_i e^{-\beta E} dq_1 \cdots dp_f}{\int e^{-\beta_i \epsilon_i} dp_i e^{-\beta E} dq_1 \cdots dp_f} \end{aligned}$$

Las integrales de la derecha tanto en el numerador como en el denominador son iguales, por lo que pueden suprimirse obteniendo lo siguiente

$$\langle \epsilon_i \rangle = \frac{\int e^{-\beta_i \epsilon_i} \epsilon_i dp_i}{\int e^{-\beta_i \epsilon_i} dp_i}$$

como  $\epsilon_i$  depende solo de la variable  $p_i$ , todas las demás variables son despreciadas para calcular el valor medio de  $\epsilon_i$ . Simplificamos relacionando la derivada del numerador con la del denominador, obteniendo así.

$$\langle \epsilon_i \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left( \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta \epsilon_i} dp_i \right)$$

Los límites de la integral son de  $-\infty$  a  $+\infty$  ya que la cantidad de movimiento  $p_i$  puede adquirir todos los valores posibles en este intervalo.

Ahora consideramos un caso específico, cuando  $\epsilon_i$  es una función cuadrática de  $p_i$  (como es el caso de la energía cinética) y tiene la forma siguiente

$$\epsilon_i = \alpha p_i^2$$

donde  $\alpha$  es una constante. Haciendo un cambio de variable  $y \equiv \beta^{\frac{1}{2}} p_i$ , se obtiene lo que se muestra a continuación.

$$\begin{aligned}
\langle \epsilon_i \rangle &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left( \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta \alpha p_i^2} dp_i \right) \\
&= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left( \beta^{-\frac{1}{2}} \int e^{-\alpha y^2} dy \right) \\
&= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left( \beta^{-\frac{1}{2}} I(y) \right)
\end{aligned}$$

como  $I(y)$  ya no depende de  $\beta$  obtenemos lo siguiente

$$\begin{aligned}
\langle \epsilon_i \rangle &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \left[ -\frac{1}{2} \ln \beta + \ln I(y) \right] \\
\langle \epsilon_i \rangle &= \frac{1}{2\beta}
\end{aligned}$$

Recordando que la  $\beta$  viene de la distribución canónica, donde se sabe que  $\beta \equiv \frac{1}{k_B T}$ , entonces tenemos

$$\langle \epsilon_i \rangle = \frac{1}{2} k_B T$$

Lo anterior solo es válido si estamos trabajando en una dimensión, es decir, cuando se cuenta con un grado de libertad, si no es el caso consideramos la forma general

$$\epsilon_i = \sum_{i=1}^n \alpha_i p_i^2$$

donde  $n$  son los grados de libertad. Para obtener la energía media se procede de forma análoga al caso anterior llegando al resultado siguiente.

$$\langle \epsilon_i \rangle = \frac{n}{2} k_B T$$

Debido al tratamiento anterior se establece una proposición general, conocido como el **teorema de equipartición** que podemos enunciar como sigue:

“Si un sistema descrito por la mecánica estadística clásica está en contacto con un reservorio de calor a temperatura  $T$ , y su energía cuenta con  $n$  términos cuadráticos independientes, este tendrá una energía media dada por  $n \left( \frac{1}{2} k_B T \right)$ .”

Este teorema se presenta de diferentes formas en la literatura, el desarrollo aquí presentado fue hecho basándose en [5, 6, 7], estos textos se pueden consultar para mayores detalles.

### 2.1.2. Ruido blanco

Un ruido blanco gaussiano  $\xi(t)$ , es un proceso gaussiano con media nula y delta correlacionado en el tiempo, es decir, que su función de autocorrelación es nula para  $t \neq t'$ . Expresando lo dicho tenemos

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

su función de autocorrelación está dada por

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

donde  $\delta(t - t')$  es la función delta de Dirac. Además tiene la característica de que su densidad espectral es una constante y en este caso es igual a uno [5].

$$\langle |\tilde{\xi}(w)|^2 \rangle = 1$$

lo que nos indica que su espectro de potencia es plana.

Para una explicación más detallada se puede consultar [5, 6].

### 2.1.3. Ecuación de Langevin

La ecuación de movimiento de una partícula browniana inmersa en un fluido es

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\zeta \mathbf{v} + \mathbf{F}(t) \quad (2.2)$$

esta ecuación es Newtoniana y estocástica, que contiene dos fuerzas características, una fuerza de fricción y una fuerza que fluctúa en el tiempo.

Los términos  $m$  y  $\mathbf{v}$  son la masa y la velocidad de la partícula respectivamente,  $-\zeta \mathbf{v}$  es la fuerza de fricción, proporcional a la velocidad. Si la partícula tiene forma esférica con radio  $a$ , el coeficiente de fricción está dado por la ley de Stokes.

$$\zeta = 6\pi\eta a$$

donde  $\eta$  es la viscosidad del fluido circundante.

El término  $\mathbf{F}(t)$  representa una fuerza aleatoria fluctuante que se origina debido a las colisiones de la partícula browniana con las moléculas del fluido. Por su posición, dicha fuerza está sujeta a dos condiciones

$$\langle \mathbf{F}(t) \rangle = 0 \quad (2.3)$$

$$\langle \mathbf{F}(t)\mathbf{F}(t') \rangle = 2\mathbf{I}B\delta(t - t') \quad (2.4)$$

donde  $\mathbf{I}$  es la matriz identidad, mientras que  $B$  mide la intensidad de los impactos o la magnitud de la fuerza fluctuante y es función de la temperatura del medio. Como no se pretende resolver un caso en particular tomamos una componente de la ecuación (2.2).

$$\frac{dv}{dt} = -\frac{\zeta}{m}v + \frac{1}{m}F(t)$$

Se resuelve la ecuación diferencial que como podemos notar es una lineal.

$$\frac{dv}{dt} + \frac{\zeta}{m}v = \frac{1}{m}F(t)$$

donde el factor integrante es

$$e^{\int \frac{\zeta}{m} dt} = e^{\frac{\zeta}{m}t}$$

por lo que su solución es de la forma siguiente

$$\frac{dv(t)}{dt} e^{\frac{\zeta}{m}t} + \frac{\zeta}{m}v(t)e^{\frac{\zeta}{m}t} = \frac{1}{m}F(t)e^{\frac{\zeta}{m}t}$$

$$\frac{d}{dt} \left( v(t)e^{\frac{\zeta}{m}t} \right) = \frac{1}{m}F(t)e^{\frac{\zeta}{m}t}$$

$$d \left( v(t)e^{\frac{\zeta}{m}t} \right) = \frac{1}{m}F(t)e^{\frac{\zeta}{m}t} dt$$

$$\int_0^t d \left( v(t)e^{\frac{\zeta}{m}t} \right) = \frac{1}{m} \int_0^t F(t_0)e^{\frac{\zeta}{m}t} dt_0$$

$$\left( v(t)e^{\frac{\zeta}{m}t} - v_0 \right) = \frac{1}{m} \int_0^t F(t_0)e^{\frac{\zeta}{m}t} dt_0$$

$$v(t) = v_0 e^{-\frac{\zeta}{m}t} + \frac{1}{m} \int_0^t F(t_0) e^{-\frac{\zeta}{m}(t-t_0)} dt_0$$

Se calcula la velocidad cuadrática media tal como se muestra a continuación

$$(v(t))^2 = v_0^2 e^{-2t\frac{\zeta}{m}} + 2\frac{v_0}{m} \int_0^t F(t_0) e^{-\frac{\zeta}{m}(t-t_0)} dt_0 +$$

$$+ \frac{1}{m^2} \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{\zeta}{m}(t-t_0)} e^{-\frac{\zeta}{m}(t-t_1)} F(t_0) F(t_1) dt_0 dt_1$$

$$\langle (v(t))^2 \rangle = v_0^2 e^{-2t\frac{\zeta}{m}} + 2\frac{v_0}{m} \int_0^t \langle F(t_0) \rangle e^{-\frac{\zeta}{m}(t-t_0)} dt_0 +$$

$$+ \frac{1}{m^2} \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{\zeta}{m}(t-t_0)} e^{-\frac{\zeta}{m}(t-t_1)} \langle F(t_0) F(t_1) \rangle dt_0 dt_1$$

Utilizando una componente cartesia de las condiciones (2.3) y (2.4) se obtiene

$$\langle v(t)^2 \rangle = v_0^2 e^{-2t\frac{\zeta}{m}} + \frac{2B}{m^2} \int_0^t \int_0^t \delta(t_0 - t_1) e^{-\frac{\zeta}{m}(t-t_0)} e^{-\frac{\zeta}{m}(t-t_1)} dt_0 dt_1$$

$$\begin{aligned}
&= v_0^2 e^{-2t\frac{\zeta}{m}} + \frac{2B}{m^2} \int_0^t e^{-2\frac{\zeta}{m}(t-t_1)} dt_1 \\
&= v_0^2 e^{-2t\frac{\zeta}{m}} + \frac{B}{\zeta m} \left[ e^{-2\frac{\zeta}{m}(t-t_1)} \Big|_0^t \right]
\end{aligned}$$

El resultado final es el siguiente

$$\langle v(t)^2 \rangle = v_0^2 e^{-2t\frac{\zeta}{m}} + \frac{B}{\zeta m} \left[ 1 - e^{-2\frac{\zeta}{m}t} \right]$$

Haciendo el límite para tiempos muy largos la expresión queda como

$$\langle v(t)^2 \rangle = \frac{B}{\zeta m} \quad (2.5)$$

Se procede a utilizar el teorema de equipartición

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{1}{2} k_B T$$

donde  $\epsilon$  es la energía cinética, por lo que la expresión queda

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} m \langle v(t)^2 \rangle &= \frac{1}{2} k_B T \\
\langle v(t)^2 \rangle &= \frac{1}{m} k_B T \quad (2.6)
\end{aligned}$$

Igualando las expresiones (2.5) y (2.6) se obtiene el valor de la fuerza estocástica.

$$B = \zeta k_B T$$

Lo anterior es un resultado particular del teorema fluctuación-disipación ya que relaciona la fuerza fluctuante con la fricción debido al fluido, tal como se muestra a continuación.

$$\langle F(t_0)F(t_1) \rangle = 2\zeta k_B T \delta(t_0 - t_1)$$

Lo anterior se conoce como **correlación delta** de la fuerza estocástica. El desarrollo presentado fue realizado a partir de lecturas especializadas acerca del tema como son [8, 9, 10]. Este y otros resultados son los más importantes en la teoría del movimiento browniano y del formalismo de Langevin.

#### 2.1.4. Difusión efectiva

Hablando en el contexto del movimiento browniano en dos dimensiones, una partícula browniana tendrá una cierta posición  $\mathbf{x}(t)$  en un tiempo  $t$  dado y su movimiento estará sujeto a fluctuaciones térmicas y fuerzas externas desde su posición inicial  $\mathbf{x}(0)$ . A este sistema se le puede asociar un tensor que cuantifique la dispersión



temporal de la partícula en el espacio de coordenadas con respecto a su condición inicial, este tensor es

$$\langle (\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(0)) \otimes (\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(0)) \rangle \quad (2.7)$$

La expresión anterior es conocida como el tensor de desplazamiento cuadrático medio [11], y sus componentes  $\langle (\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(0))^2 \rangle$  se llaman desplazamiento cuadrático medio de  $\mathbf{x}$ . Si se toma la condición inicial de  $\mathbf{x}(0) = 0$ , este tensor se puede escribir como

$$\langle \mathbf{x} \otimes \mathbf{x} \rangle = \begin{pmatrix} \langle x_1 x_1 \rangle & \langle x_1 x_2 \rangle \\ \langle x_2 x_1 \rangle & \langle x_2 x_2 \rangle \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

Este desplazamiento cuadrático medio está relacionado con la varianza y también se le denomina segundo momento del desplazamiento [10]. Tomando en cuenta lo anterior, hay una forma más precisa de cuantificar el movimiento estocástico de una partícula browniana que es mediante la siguiente expresión

$$D_E = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle \mathbf{x}(t) \cdot \mathbf{x}(t) \rangle}{(2d)t} \quad (2.9)$$

Lo anterior es conocido como el coeficiente de difusión efectivo [12], donde  $d$  es la dimensión espacial que en este caso es  $d = 2$ . En el caso del movimiento browniano clásico el desplazamiento cuadrático medio en una dimensión está dado por

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \frac{2k_B T}{\zeta} t \quad (2.10)$$

y el coeficiente de difusión es

$$D = \frac{k_B T}{\zeta} \quad (2.11)$$

donde  $k_B$  es la constante de Boltzmann,  $T$  es la temperatura y  $\zeta$  es el coeficiente de arrastre del medio. Esta última expresión es la conocida relación de Einstein [8, 10].

## Difusión rotacional

El movimiento browniano rotacional es el cambio aleatorio en la orientación de una partícula debido al ruido estocástico del medio. Uno de los primeros en discutir el movimiento browniano rotacional fue Peter Debye [13], quien aplicó la teoría del movimiento browniano traslacional a la rotación de moléculas que tienen dipolos eléctricos permanentes.

Los parámetros que se utilizan para establecer las fórmulas del desplazamiento cuadrático medio pueden extenderse al movimiento browniano rotacional alrededor del diámetro de una partícula en suspensión. Solo que en este caso la coordenada de interés es el ángulo de rotación  $\theta$  en lugar de la posición  $\mathbf{x}$ , pero el resto del tratamiento es análogo al caso del movimiento browniano convencional [8], por lo que el desplazamiento angular cuadrático medio está dado por

$$\langle (\Delta\theta)^2 \rangle = \frac{2k_B T}{\zeta_r} \tau \quad (2.12)$$

donde  $\tau$  es el tiempo y  $\zeta_r$  es el coeficiente de arrastre rotacional, que en el caso de una esfera que gira alrededor de un eje fijo en un líquido viscoso es [13]

$$\zeta_r = 8\pi a^3 \eta$$

en esta expresión  $a$  es el radio de la esfera y  $\eta$  es la viscosidad. Mientras que el coeficiente de difusión rotacional que le corresponde está dado por

$$D_\Omega = \frac{\langle (\Delta\theta)^2 \rangle}{2\tau} \quad (2.13)$$

sustituyendo el valor del desplazamiento angular cuadrático medio se tiene

$$D_\Omega = \frac{k_B T}{\zeta_r} \quad (2.14)$$

Esta expresión es el coeficiente de difusión rotacional.

## 2.2. Movimiento browniano activo

### 2.2.1. La materia activa

Una de las ramas de la física más actuales que han atraído a expertos de diferentes áreas de investigación es la “materia activa”, que se ha convertido en un campo de investigación multidisciplinario con rápida expansión, esta área nace en el seno de la física estadística en la interface entre la física de la materia blanda y la biología. Su estudio trae varios retos teóricos y experimentales, pero con aplicaciones en distintos campos de estudio que va desde las ciencias básicas como la matemática, física y química hasta las ciencias sociales como la sociología y la economía. La materia activa estudia un conjunto de elementos que tienen la capacidad de tomar energía de su entorno y convertirlo en trabajo, cabe mencionar que no necesariamente tienen que ser fenómenos físicos, pueden ser fenómenos en los cuales exista un proceso análogo al descrito de tal forma que se puedan utilizar las herramientas teóricas de esta disciplina, como es el caso de la teoría en el mercado económico en donde el análogo de la energía es la “liquidez” [14]. Una de las principales razones por la que este campo de investigación está teniendo un gran auge es por sus posibles aplicaciones en la medicina y en la creación de materiales activos con propiedades exóticas.

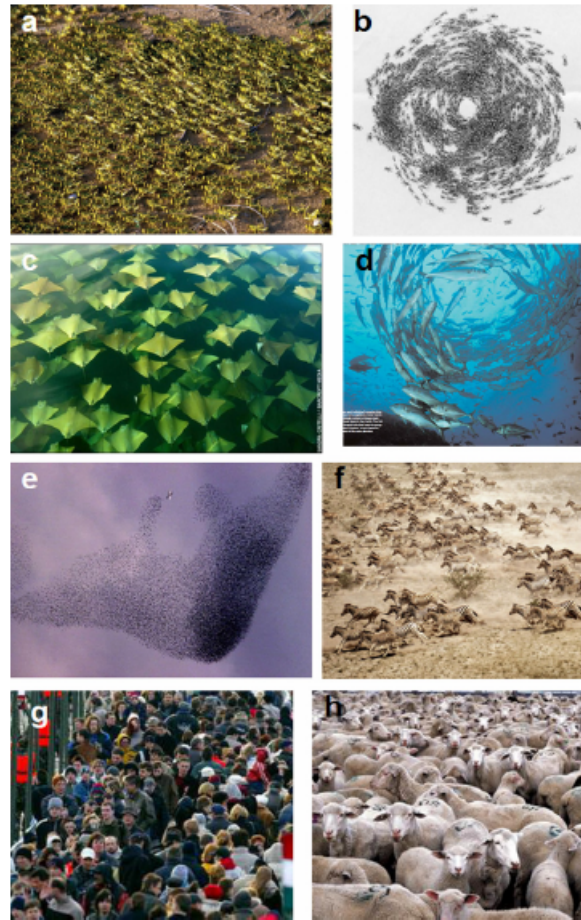


Figura 2.1: Se presenta una galería de imágenes relacionadas con el comportamiento colectivo. Entre otros, ilustra la posible existencia de patrones de comportamiento muy generales. (a) Langostas sin alas marchando en el campo. (b) Una colonia rotatoria de hormigas armadas. (c) Una matriz tridimensional de rayos dorados. (d) Se sabe que los peces producen tales vórtices. (e) Antes de posarse, miles de estorninos producen una fascinante exhibición aérea. También están tratando de evitar un ave depredadora cerca de la estructura central en forma de dedo. (f) Una manada de cebras. (g) Personas ordenadas espontáneamente en “carriles de tráfico” cuando cruzan un puente peatonal en grandes cantidades. (h) Aunque se sabe que las ovejas se mueven de manera muy coherente, tal como predice la teoría correspondiente, cuando simplemente están merodeando (sin movimiento), no pueden surgir patrones de orientación bien desarrollados [1].

El tema es fascinante en sí ya que los fenómenos físicos relacionados con la materia activa están presentes en todas las escalas de medida, es decir, las podemos encontrar desde la escala nanoscópica hasta escalas macroscópicas y algunos de estos fenómenos son observables a simple vista. Para tener en claro que fenómenos entran en el estudio de esta área podemos dar ejemplos concretos de materia activa, en escala macroscópica por ejemplo tenemos a todos los seres vivos que toman energía de su entorno cuando se alimentan, estos alimentos son procesados en el cuerpo del

ser vivo por medio de procesos metabólicos complejos y convierten dicha energía en movimiento mecánico para hacer distintas tareas que lo ayuden a sobrevivir. Lo que nos quiere decir lo anterior es que los humanos, aves, peces, insectos, etc. se consideran materia activa al igual que los entes artificiales como robots que funcionan con algún tipo de batería. A escala microscópica se tienen microorganismos como las bacterias o los llamados motores moleculares que son un conjunto de moléculas que convierten energía química en movimiento mecánico llevando a cabo tareas específicas a nivel celular. Otra cosa que es de gran interés en el área de materia activa es estudiar cómo estos colectivos de elementos interactúan entre sí dando como resultado comportamientos complejos, como son fenómenos de autoorganización y de emergencia.

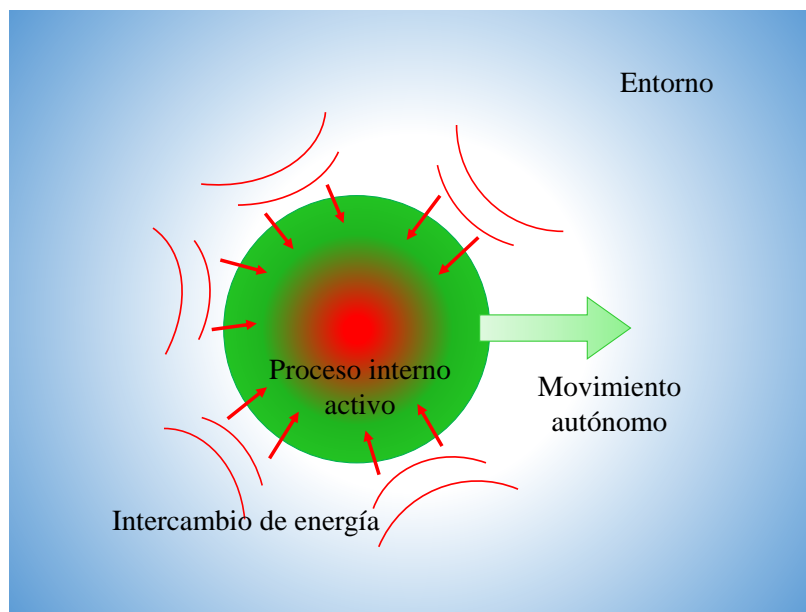


Figura 2.2: Esquema de una partícula activa que toma energía de su entorno y mediante un proceso interno lo transforma en movimiento dirigido.

Los sistemas de materia activa se consideran procesos fuera de equilibrio debido a que toman energía de su entorno y mediante un proceso interno que tiene lugar en los mismos entes activos estos logran moverse de forma autónoma. Los entes activos pueden ser biológicos o artificiales, lo que distingue a las partículas activas es precisamente su capacidad de interactuar con su entorno intercambiando energía y utilizando este intercambio de energía para realizar trabajo. Para poder estudiar a estos entes se han propuesto diversos modelos simplificados los cuales han servido como punto de partida para desentrañar los secretos que aún nos guarda la naturaleza. Para un mejor entendimiento se presenta un esquema simple de una partícula activa (Figura 2.2).

En los últimos años se ha tenido un gran avance en este campo de estudio, por lo que algunos investigadores han considerado necesario hacer recuentos acerca de los

avances más importantes sobre el tema, como es el caso de Marchetti y col. [15]. En el reporte realizado por Marchetti y sus colegas hacen una revisión de forma resumida enfocándose en experimentos, en esta revisión tratan de integrar varios enfoques propuestos en la literatura, desde el semi-microscópico hasta el fenomenológico, también hace un análisis acerca de las similitudes y diferencias entre el estado nemático y polar, y al final hace algunas sugerencias para extensiones hacia un mayor realismo en contextos específicos, desde la biología celular hasta el comportamiento animal. Una revisión más reciente fue hecha por Gerhard Gompper y sus colegas [16], en donde hablan de avances más actuales tanto teóricos como experimentales y de los retos que se tienen por delante.

A continuación se presentan algunos resultados reportados sobre partículas activas brownianas que son resultados previos a esta investigación y que pueden recuperarse con los resultados que reportamos en el presente trabajo haciendo casos límites.

### 2.2.2. Partícula browniana activa libre

Consideremos una partícula micrométrica libre en 2 dimensiones la cual solo está sujeta a fluctuaciones térmicas del medio en donde se encuentra, por lo que se puede considerar una partícula browniana, pero esta partícula tiene la capacidad de tomar energía de su entorno para autopropulsarse con una velocidad constante.

#### Soluciones a las ecuaciones de movimiento

Recordemos que el movimiento browniano se encuentra en el caso sobreamortiguado de la ecuación de Langevin, esto quiere decir que la ecuación de movimiento se simplifica al considerar la parte inercial como despreciable. Tomando en cuenta lo anterior, la ecuación de Langevin correspondiente al sistema planteado de una partícula browniana activa libre en 2D está dado por

$$\frac{d\mathbf{r}(t)}{dt} = U_0\mathbf{q}(t) + \mathbf{f}(t) \quad (2.15)$$

Como la partícula es activa se introduce un término extra que corresponde a la autopropulsión de la partícula que se mueve con una velocidad  $U_0$  constante en la dirección de su vector director  $\mathbf{q}(t) = (\cos\theta(t), \sin\theta(t))$ , mientras que  $\mathbf{f}(t)$  son las fluctuaciones térmicas del medio. Tomando en cuenta que las fluctuaciones térmicas también afectan en la parte rotacional, a la partícula se le asocia un coeficiente de difusión rotacional  $D_\Omega$ , y el vector de orientación  $\mathbf{q}$  cambia por ruido rotacional ya que está sujeta a la siguiente relación

$$\frac{d\mathbf{q}(t)}{dt} = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{q}(t) \quad (2.16)$$

con

$$\boldsymbol{\Omega} = g(t) \quad (2.17)$$

en donde  $\boldsymbol{\Omega}$  es la velocidad angular y  $g(t)$  es una torca estocástica debida al medio. Ya que el sistema quedó descrito se procede a resolver la ecuación de movimiento traslacional

$$d\mathbf{r}(t) = U_0 \mathbf{q}(t) dt + \mathbf{f}(t) dt$$

$$\int d\mathbf{r}(t) = \int_0^t U_0 \mathbf{q}(t_1) dt_1 + \int_0^t \mathbf{f}(t_1) dt_1$$

$$\mathbf{r}(t) = \int_0^t U_0 \mathbf{q}(t_1) dt_1 + \int_0^t \mathbf{f}(t_1) dt_1$$

Como estamos en 2D se tiene dos componentes de la posición.

$$x(t) = U_0 \int_0^t q_1(t_1) dt_1 + \int_0^t f_1(t_1) dt_1$$

$$y(t) = U_0 \int_0^t q_2(t_1) dt_1 + \int_0^t f_2(t_1) dt_1$$

### Desplazamiento cuadrático medio

Se procede a calcular el desplazamiento cuadrático medio para partículas brownianas activas libres. El cálculo se hace para una de las componentes ya que para la otra componente el cálculo es similar.

$$\begin{aligned} x(t)x(t) &= U_0^2 \int_0^t \int_0^t q_1(t_1)q_1(t_2) dt_2 dt_1 + U_0 \int_0^t \int_0^t q_1(t_1)f_1(t_2) dt_2 dt_1 + \\ &+ U_0 \int_0^t \int_0^t f_1(t_1)q_1(t_2) dt_2 dt_1 + \int_0^t \int_0^t f_1(t_1)f_1(t_2) dt_2 dt_1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle x(t)x(t) \rangle &= U_0^2 \int_0^t \int_0^t \langle q_1(t_1)q_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 + U_0 \int_0^t \int_0^t \langle q_1(t_1)f_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 + \\ &+ U_0 \int_0^t \int_0^t \langle f_1(t_1)q_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 + \int_0^t \int_0^t \langle f_1(t_1)f_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \end{aligned}$$

Como  $\mathbf{f}(t)$  es el termino estocástico cumple las siguientes condiciones

$$\langle \tilde{\mathbf{f}}(t) \rangle = 0 \tag{2.18}$$

$$\langle \tilde{f}_i(t_1)\tilde{f}_j(t_2) \rangle = 2k_B T \zeta \delta_{ij} \delta(t_1 - t_2)$$

$$\langle f_i(t_1)f_j(t_2) \rangle = 2D_0\delta_{ij}\delta(t_1 - t_2) \quad (2.19)$$

$$D_0 = \frac{k_B T}{\zeta}$$

$$\langle f_i(t_1)q_j(t_2) \rangle = 0 \quad (2.20)$$

Por lo tanto

$$\langle x(t)^2 \rangle = U_0^2 \int_0^t \int_0^t \langle q_1(t_1)q_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 + 2 \int_0^t \int_0^t D_0 \delta(t_1 - t_2) dt_2 dt_1$$

Resolviendo la segunda integral obtenemos

$$\langle x(t)^2 \rangle = U_0^2 \int_0^t \int_0^t \langle q_1(t_1)q_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 + 2D_0 t \quad (2.21)$$

La correlación más general del vector de orientación que considera un ángulo inicial  $\theta_0$  distinto de cero ya ha sido reportada [17, 18], de ello se sabe que la correlación entre las mismas componentes son las siguientes

$$\langle q_1(t')q_1(t'') \rangle = \frac{1}{2} e^{-D_\Omega(t'-t'')} \left[ 1 + \cos(2\theta_0) e^{-4D_\Omega t''} \right] \quad (2.22)$$

$$\langle q_2(t')q_2(t'') \rangle = \frac{1}{2} e^{-D_\Omega(t'-t'')} \left[ 1 - \cos(2\theta_0) e^{-4D_\Omega t''} \right] \quad (2.23)$$

Las correlaciones cruzadas no se toman en cuenta ya que su contribución al desplazamiento cuadrático medio es nula a tiempos largos ( $t \rightarrow \infty$ ), debido a que hay simetría en nuestro sistema. Continuando con los cálculos, se procede a calcular la integral

$$\begin{aligned} \Upsilon &= U_0^2 \int_0^t \int_0^t \langle q_1(t_1)q_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \\ &= U_0^2 \int_0^t \left[ \int_0^{t_1} \langle q_1(t_2)q_1(t_1) \rangle dt_2 + \int_{t_1}^t \langle q_1(t_1)q_1(t_2) \rangle dt_2 \right] dt_1 \end{aligned}$$

Resolvemos por partes, primero se sustituye la correlación de las componentes del vector director y se resuelve la integral.

$$\begin{aligned} \int_0^{t_1} \langle q_1(t_2)q_1(t_1) \rangle dt_2 &= \frac{1}{2} \left[ \int_0^{t_1} e^{-D_\Omega(t_2-t_1)} dt_2 + \cos(2\theta_0) \int_0^{t_1} e^{-D_\Omega(t_2+3t_1)} dt_2 \right] \\ &= \frac{1}{2D_\Omega} \left[ -e^{-D_\Omega(t_2-t_1)} \Big|_0^{t_1} - \cos(2\theta_0) e^{-D_\Omega(t_2+3t_1)} \Big|_0^{t_1} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2D_\Omega} [-1 + e^{D_\Omega t_1} - \cos(2\theta_0) (e^{-4D_\Omega t_1} - e^{-3D_\Omega t_1})] \\
\int_{t_1}^t \langle q_1(t_1)q_1(t_2) \rangle dt_2 &= \frac{1}{2} \left[ \int_{t_1}^t e^{-D_\Omega(t_1-t_2)} dt_2 + \cos(2\theta_0) \int_{t_1}^t e^{-D_\Omega(t_1+3t_2)} dt_2 \right] \\
&= \frac{1}{2D_\Omega} [-e^{-D_\Omega(t_1-t_2)}|_{t_1}^t - \cos(2\theta_0)e^{-D_\Omega(t_1+3t_2)}|_{t_1}^t] \\
&= \frac{1}{2D_\Omega} \left[ e^{-D_\Omega(t_1-t)} - 1 - \frac{\cos(2\theta_0)}{3} (e^{-D_\Omega(t_1+3t)} - e^{-4D_\Omega t_1}) \right]
\end{aligned}$$

Debido a que este resultado ya es conocido no se muestra el resto de los cálculos, pero continuando con la solución de las integrales se puede probar que el desplazamiento cuadrático medio para la componente  $x(t)$ , al aplicar el límite para tiempos largos ( $t \rightarrow \infty$ ), es

$$\langle x(t)^2 \rangle = \left( \frac{U_0^2}{D_\Omega} + 2D_0 \right) t \quad (2.24)$$

Para la correlación de la componente  $y(t)$  se procede de igual manera que se hizo con la componente  $x(t)$ . Debido a que la segunda parte de la correlación de las componentes del vector director en (2.23) se desprecia para tiempos largos, la solución es la misma. Por lo anterior el desplazamiento cuadrático medio para las partículas brownianas activas resulta ser

$$\langle \mathbf{r} \cdot \mathbf{r} \rangle = 2t \left( \frac{U_0^2}{D_\Omega} + 2D_0 \right) \quad (2.25)$$

La expresión anterior nos dice que el MSD para una partícula browniana activa libre es lineal en el tiempo, lo que nos sugiere una difusión normal y cuyo coeficiente de difusión efectiva ( $D_E = \langle \mathbf{r} \cdot \mathbf{r} \rangle / 4t$ ) es la siguiente

$$D_E = \frac{U_0^2}{2D_\Omega} + D_0 \quad (2.26)$$

Note que en la expresión anterior  $D_0$  es la difusión browniana clásica (2.11). Ahora, si la velocidad de propulsión de la partícula fuera nula  $U_0 = 0$  la difusión efectiva sería igual al del caso pasivo  $D_E = D_0$ , lo que implica que el movimiento de la partícula solo estaría sujeta a las fluctuaciones térmicas. Lo anterior es lo que se esperaría de forma intuitiva y la expresión precisamente cumple con ello, por lo que este resultado es consistente.



### 2.2.3. Partícula browniana activa en una trampa armónica

Otro resultado previo de interés es el correspondiente a una partícula browniana activa sujeta a una trampa armónica, ya que el tema abordado en el Capítulo 3 se podría considerar una extensión de este caso, por ello se presenta este caso con mayor detalle en los cálculos. La ecuación de movimiento correspondiente es la siguiente,

$$\frac{d\mathbf{r}(t)}{dt} = -\frac{k\mathbf{r}(t)}{\zeta} + U_0\mathbf{q}(t) + \mathbf{f}(t) \quad (2.27)$$

para resolver esta ecuación con la presencia de la trampa armónica ( $k\mathbf{r}(t)$ ) se procede a reescribirlo de la siguiente forma

$$\frac{d\mathbf{r}(t)}{dt} + \frac{k\mathbf{r}(t)}{\zeta} = U_0\mathbf{q}(t) + \mathbf{f}(t)$$

Hacemos las siguientes definiciones y resolvemos la ecuación anterior.

$$P \equiv \frac{k}{\zeta}$$

$$B(t) \equiv U_0\mathbf{q}(t) + \mathbf{f}(t)$$

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} + P(t)\mathbf{r} = B(t)$$

La función de peso es

$$e^{\int P(t)dt} = e^{\int \frac{k}{\zeta} dt} = e^{\frac{k}{\zeta}t}$$

$$e^{\frac{k}{\zeta}t} \frac{d\mathbf{r}}{dt} + P(t)e^{\frac{k}{\zeta}t}\mathbf{r} = B(t)e^{\frac{k}{\zeta}t}$$

$$e^{\frac{k}{\zeta}t} \frac{d\mathbf{r}}{dt} + \frac{k}{\zeta}e^{\frac{k}{\zeta}t}\mathbf{r} = U_0\mathbf{q}(t)e^{\frac{k}{\zeta}t} + \mathbf{f}(t)e^{\frac{k}{\zeta}t}$$

$$\frac{d}{dt} \left[ e^{\frac{k}{\zeta}t}\mathbf{r} \right] = U_0\mathbf{q}(t)e^{\frac{k}{\zeta}t} + \mathbf{f}(t)e^{\frac{k}{\zeta}t}$$

$$\int d \left[ e^{\frac{k}{\zeta}t}\mathbf{r} \right] = U_0 \int_0^t \mathbf{q}(t_1)e^{\frac{k}{\zeta}t_1} dt_1 + \int_0^t \mathbf{f}(t_1)e^{\frac{k}{\zeta}t_1} dt_1$$

$$\mathbf{r}e^{\frac{k}{\zeta}t} = U_0 \int_0^t \mathbf{q}(t_1)e^{\frac{k}{\zeta}t_1} dt_1 + \int_0^t \mathbf{f}(t_1)e^{\frac{k}{\zeta}t_1} dt_1$$

$$\mathbf{r}(t) = e^{-\frac{k}{\zeta}t} \left( U_0 \int_0^t \mathbf{q}(t_1)e^{\frac{k}{\zeta}t_1} dt_1 + \int_0^t \mathbf{f}(t_1)e^{\frac{k}{\zeta}t_1} dt_1 \right)$$

de igual manera cuenta con dos componentes como en el primer caso.

$$\begin{aligned}
x(t) &= U_0 \int_0^t q_1(t_1) e^{-\frac{k}{\zeta}(t-t_1)} dt_1 + \int_0^t f_1(t_1) e^{-\frac{k}{\zeta}(t-t_1)} dt_1 \\
y(t) &= U_0 \int_0^t q_2(t_1) e^{-\frac{k}{\zeta}(t-t_1)} dt_1 + \int_0^t f_2(t_1) e^{-\frac{k}{\zeta}(t-t_1)} dt_1
\end{aligned}$$

### Desplazamiento cuadrático medio

Ahora se procede a calcular el desplazamiento cuadrático medio para el caso cuando hay una trampa armónica actuando sobre el sistema. El procedimiento será el mismo que se utilizó en el otro caso, haciendo así el cálculo para una componente.

$$\begin{aligned}
x(t)x(t) &= U_0^2 \int_0^t \int_0^t q_1(t_1)q_1(t_2) e^{-\frac{k}{\zeta}(t-t_1)} e^{-\frac{k}{\zeta}(t-t_2)} dt_2 dt_1 + \\
&+ U_0 \int_0^t \int_0^t f_1(t_1)q_1(t_2) e^{-\frac{k}{\zeta}(t-t_1)} e^{-\frac{k}{\zeta}(t-t_2)} dt_2 dt_1 + \\
&+ U_0 \int_0^t \int_0^t q_1(t_1)f_1(t_2) e^{-\frac{k}{\zeta}(t-t_1)} e^{-\frac{k}{\zeta}(t-t_2)} dt_2 dt_1 + \\
&+ \int_0^t \int_0^t f_1(t_1)f_1(t_2) e^{-\frac{k}{\zeta}(t-t_1)} e^{-\frac{k}{\zeta}(t-t_2)} dt_2 dt_1 + \\
\langle x(t)x(t) \rangle &= U_0^2 \int_0^t \int_0^t \langle q_1(t_1)q_1(t_2) \rangle e^{-\frac{k}{\zeta}(2t-t_1-t_2)} dt_2 dt_1 + \\
&+ U_0 \int_0^t \int_0^t \langle f_1(t_1)q_1(t_2) \rangle e^{-\frac{k}{\zeta}(2t-t_1-t_2)} dt_2 dt_1 + \\
&+ U_0 \int_0^t \int_0^t \langle q_1(t_1)f_1(t_2) \rangle e^{-\frac{k}{\zeta}(2t-t_1-t_2)} dt_2 dt_1 + \\
&+ \int_0^t \int_0^t \langle f_1(t_1)f_1(t_2) \rangle e^{-\frac{k}{\zeta}(2t-t_1-t_2)} dt_2 dt_1 +
\end{aligned}$$

Las componentes estocásticas cumplen con las condiciones en (2.19) y (2.20) por lo que se obtiene

$$\begin{aligned}
\langle x(t)x(t) \rangle &= U_0^2 \int_0^t \int_0^t \langle q_1(t_1)q_1(t_2) \rangle e^{-\frac{k}{\zeta}(2t-t_1-t_2)} dt_2 dt_1 + \\
&+ \int_0^t \int_0^t 2D_0 e^{-\frac{k}{\zeta}(2t-t_1-t_2)} \delta(t_1 - t_2) dt_2 dt_1 \\
&= U_0^2 \int_0^t \int_0^t \langle q_1(t_1)q_1(t_2) \rangle e^{-\frac{k}{\zeta}(2t-t_1-t_2)} dt_2 dt_1 +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +2D_0 \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{2k}{\zeta}(t-t_1)} dt_1 \\
& = U_0^2 \int_0^t \int_0^t \langle q_1(t_1)q_1(t_2) \rangle e^{-\frac{k}{\zeta}(2t-t_1-t_2)} dt_2 dt_1 + \frac{D_0 \zeta}{k} \left(1 - e^{-\frac{2k}{\zeta}t}\right)
\end{aligned}$$

Hacemos las definiciones siguientes

$$\begin{aligned}
\mathfrak{S}(t) & = \int_0^t \int_0^t \langle q_1(t_1)q_1(t_2) \rangle e^{-\frac{k}{\zeta}(2t-t_1-t_2)} dt_2 dt_1 \\
& = \int_0^t \left[ \int_0^{t_1} \langle q_1(t_1)q_1(t_2) \rangle e^{-\frac{k}{\zeta}(2t-t_1-t_2)} dt_2 \right. \\
& \quad \left. + \int_{t_1}^t \langle q_1(t_2)q_1(t_1) \rangle e^{-\frac{k}{\zeta}(2t-t_1-t_2)} dt_2 \right] dt_1 \\
& = \int_0^t [\vartheta_1 + \vartheta_2] dt_1
\end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned}
\vartheta_1 & = \int_0^{t_1} \langle q_1(t_1)q_1(t_2) \rangle e^{-\frac{k}{\zeta}(2t-t_1-t_2)} dt_2 \\
\vartheta_2 & = \int_{t_1}^t \langle q_1(t_2)q_1(t_1) \rangle e^{-\frac{k}{\zeta}(2t-t_1-t_2)} dt_2
\end{aligned}$$

Resolvemos por separado utilizando las funciones de correlación de las componentes del vector director

$$\vartheta_1 = \int_0^{t_1} \left( \frac{1}{2} e^{-D_\Omega(t_1-t_2)} [1 + \cos(2\theta_0) e^{-4D_\Omega t_2}] \right) e^{-\frac{k}{\zeta}(2t-t_1-t_2)} dt_2$$

Pero se sabe que la segunda parte de la función de correlación tiende a cero para tiempos largos, por lo que solo consideramos la primera parte. Entonces la integral a resolver es

$$\begin{aligned}
\vartheta_1 & = \frac{1}{2} \int_0^{t_1} e^{-D_\Omega(t_1-t_2)} e^{-\frac{k}{\zeta}(2t-t_1-t_2)} dt_2 \\
& = \frac{1}{2} \int_0^{t_1} e^{-(2t\frac{k}{\zeta} + t_1[D_\Omega - \frac{k}{\zeta}] - t_2[D_\Omega + \frac{k}{\zeta}])} dt_2 \\
& = \frac{1}{2} \frac{1}{D_\Omega + \frac{k}{\zeta}} e^{-(2t\frac{k}{\zeta} + t_1[D_\Omega - \frac{k}{\zeta}] - t_2[D_\Omega + \frac{k}{\zeta}])} \Big|_0^{t_1} \\
& = \frac{1}{2 \left(D_\Omega + \frac{k}{\zeta}\right)} \left( e^{-(2t\frac{k}{\zeta} - 2t_1\frac{k}{\zeta})} - e^{-(2t\frac{k}{\zeta} + [D_\Omega - \frac{k}{\zeta}]t_1)} \right)
\end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2 \left( D_\Omega + \frac{k}{\zeta} \right)} \left( e^{-\frac{2k}{\zeta}(t-t_1)} - e^{-(2t\frac{k}{\zeta} + [D_\Omega - \frac{k}{\zeta}]t_1)} \right)$$

Tambien se resuelve  $\vartheta_2$ .

$$\begin{aligned} \vartheta_2 &= \frac{1}{2} \int_{t_1}^t e^{-D_\Omega(t_2-t_1)} e^{-\frac{k}{\zeta}(2t-t_1-t_2)} dt_2 \\ &= \frac{1}{2} \int_{t_1}^t e^{-(2t\frac{k}{\zeta} - t_1[D_\Omega + \frac{k}{\zeta}] + t_2[D_\Omega - \frac{k}{\zeta}])} dt_2 \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{\frac{k}{\zeta} - D_\Omega} e^{-(2t\frac{k}{\zeta} - t_1[D_\Omega + \frac{k}{\zeta}] + t_2[D_\Omega - \frac{k}{\zeta}])} dt_2 \Big|_{t_1}^t \\ &= \frac{1}{2 \left( \frac{k}{\zeta} - D_\Omega \right)} \left( e^{-(t[\frac{k}{\zeta} + D_\Omega] - t_1[D_\Omega + \frac{k}{\zeta}])} - e^{-\frac{2k}{\zeta}(t-t_1)} \right) \end{aligned}$$

Con los resultados obtenidos podemos resolver la integral de  $\mathfrak{S}(t)$  como se puede observar a continuación

$$\begin{aligned} \mathfrak{S}(t) &= \int_0^t \vartheta_1 dt_1 + \int_0^t \vartheta_2 dt_1 \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{D_\Omega + \frac{k}{\zeta}} \left[ \int_0^t e^{-\frac{2k}{\zeta}(t-t_1)} dt_1 - \int_0^t e^{-(2t\frac{k}{\zeta} + [D_\Omega - \frac{k}{\zeta}]t_1)} dt_1 \right] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\frac{k}{\zeta} - D_\Omega} \left[ \int_0^t e^{-(t[\frac{k}{\zeta} + D_\Omega] - t_1[D_\Omega + \frac{k}{\zeta}])} dt_1 - \int_0^t e^{-\frac{2k}{\zeta}(t-t_1)} dt_1 \right] \right\} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{D_\Omega + \frac{k}{\zeta}} \left[ \frac{\zeta}{2k} e^{-\frac{2k}{\zeta}(t-t_1)} \Big|_0^t - \frac{1}{\frac{k}{\zeta} - D_\Omega} e^{-(2t\frac{k}{\zeta} + [D_\Omega - \frac{k}{\zeta}]t_1)} \Big|_0^t \right] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\frac{k}{\zeta} - D_\Omega} \left[ \frac{1}{D_\Omega + \frac{k}{\zeta}} e^{-(t[\frac{k}{\zeta} + D_\Omega] - t_1[D_\Omega + \frac{k}{\zeta}])} \Big|_0^t - \frac{\zeta}{2k} e^{-\frac{2k}{\zeta}(t-t_1)} \Big|_0^t \right] \right\} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{D_\Omega + \frac{k}{\zeta}} \left[ \frac{\zeta}{2k} \left( 1 - e^{-\frac{2k}{\zeta}} \right) - \frac{1}{\frac{k}{\zeta} - D_\Omega} \left( e^{-t(\frac{k}{\zeta} + D_\Omega)} - e^{-\frac{2k}{\zeta}} \right) \right] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\frac{k}{\zeta} - D_\Omega} \left[ \frac{1}{D_\Omega + \frac{k}{\zeta}} \left( 1 - e^{-t(\frac{k}{\zeta} + D_\Omega)} \right) - \frac{\zeta}{2k} \left( 1 - e^{-\frac{2k}{\zeta}} \right) \right] \right\} \end{aligned}$$

Hacemos el limite para tiempos largos

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathfrak{S}(t) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{D_\Omega + \frac{k}{\zeta}} \left[ \frac{\zeta}{2k} \right] + \frac{1}{\frac{k}{\zeta} - D_\Omega} \left[ \frac{1}{D_\Omega + \frac{k}{\zeta}} - \frac{\zeta}{2k} \right] \right\}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \left[ \frac{\zeta \left( \frac{k}{\zeta} - D_\Omega \right) + 2k - \zeta \left( D_\Omega + \frac{k}{\zeta} \right)}{2k \left( \frac{k}{\zeta} - D_\Omega \right) \left( \frac{k}{\zeta} + D_\Omega \right)} \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[ \frac{2k - 2\zeta D_\Omega}{2k \left( \frac{k}{\zeta} - D_\Omega \right) \left( \frac{k}{\zeta} + D_\Omega \right)} \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[ \frac{2\zeta \left( \frac{k}{\zeta} - D_\Omega \right)}{2k \left( \frac{k}{\zeta} - D_\Omega \right) \left( \frac{k}{\zeta} + D_\Omega \right)} \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[ \frac{\zeta}{k \left( D_\Omega + \frac{k}{\zeta} \right)} \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{\frac{D_\Omega k}{\zeta} \left( 1 + \frac{k}{\zeta D_\Omega} \right)} \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{D_\Omega^2 \frac{k}{\zeta D_\Omega} \left( 1 + \frac{k}{\zeta D_\Omega} \right)} \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[ \frac{\tau_R^2}{\alpha (1 + \alpha)} \right]
\end{aligned}$$

donde  $\tau_R \equiv \frac{1}{D_\Omega}$  y  $\alpha \equiv \frac{k}{\zeta D_\Omega}$ . Por lo tanto la expresión del desplazamiento cuadrático medio para una componente considerando tiempos largos resulta ser

$$\langle x(t)x(t) \rangle = \frac{U_0^2}{2} \left( \frac{\tau_R^2}{\alpha (1 + \alpha)} \right) + D_0 \tau_T \quad (2.28)$$

donde  $\tau_T \equiv \frac{\zeta}{k}$ . Para la otra componente se encuentra el mismo resultado, ya que como se mencionó anteriormente la segunda parte de la correlación de las componentes del vector director se desprecian para tiempos largos, tomando en cuenta esto, el desplazamiento cuadrático medio para partículas brownianas activas en una trampa armónica a tiempos largos es

$$\langle \mathbf{r}(t) \cdot \mathbf{r}(t) \rangle = \frac{U_0^2 \tau_R^2}{\alpha (1 + \alpha)} + 2D_0 \tau_T \quad (2.29)$$

Como se puede notar la expresión del MSD para este caso es una constante, por lo que se diferencia del caso libre ya que como se puede ver en (2.25) su MSD es lineal en el tiempo. Entonces la diferencia principal es que el MSD en presencia de una trampa armónica se satura, esto nos indica que las partículas están atrapadas, por lo que no se pueden difundir más allá de una cierta distancia la cual se puede deducir a partir del MSD.



# Capítulo 3

## Robots hexbug-nano activos atrapados: teoría y experimento

### 3.1. Introducción

La comprensión y caracterización de la materia activa [19, 15, 20, 21, 22, 23, 16, 24, 25] empleando partículas granulares vibradas ya tiene mucho tiempo. Algunos trabajos pioneros son Yamada y col. [26] quien informó un movimiento de traslación coherente de una partícula polar asimétrica debido a vibraciones externas. Por su parte Peruani y col. [27] hicieron un estudio sobre comportamientos colectivos de barras autopropulsadas activas que interactúan a través del volumen de exclusión y como resultado de las fuerzas de contacto observaron la posibilidad de separación de fase y de orden. Kudrolli y col. [28] estudió el movimiento colectivo de partículas de varillas anisotrópicas y encontró agregación, acumulación de paredes e incluso movimiento de remolino. Recientemente Großman y col. [29] mostró cómo las tensiones de no equilibrio que actúan entre barras autopropulsadas desestabilizan la separación de fases inducida por la motilidad. Por otro lado, para partículas isotrópicas, Deseigne y col. [30] encontró un orden de orientación de largo alcance (movimiento colectivo) y fuertes fluctuaciones numéricas al agitar las partículas. También investigaron el efecto del tamaño del sistema en la aparición de la conducta colectiva [31]. Junot y col. [32] obtuvo experimentalmente la presión mecánica de discos polares autopropulsados ejercida sobre membranas flexibles. Descubrieron que para los discos autopropulsados, la presión mecánica depende de las propiedades de la membrana en uso, lo que demuestra la falta de una ecuación de estado para este sistema activo. También se han estudiado vibrobots similares, pero con asimetrías en su cuerpo [33]. Más recientemente, Scholz y col. [4] y Sandoval [34] encontraron que en los sistemas agitados anteriores y cuando la inercia no puede ser despreciada, su coeficiente de difusión efectivo se ve reforzado por la inercia rotacional debido a un acoplamiento intrínseco entre los grados de libertad traslacional y rotacional. También se ha informado de la presión de nado y de Reynolds para un sistema de discos inerciales que no interactúan [34], y últimamente los discos inerciales que no interactúan bajo un pozo armónico fueron caracterizados teóricamente y numéricamente por Gutiérrez y Sandoval [35].

Una forma alternativa de generar propulsión es que las propias partículas granulares produzcan vibraciones mediante un motor interno. Un ejemplo de esto son los robots de juguete llamados hexbugs-nano [2]. Curiosamente, la dinámica de esos robots ha atraído la atención recientemente.



Figura 3.1: Imagen de un robot hexbug-nano [2], en la figura se puede observar las patas con las que el robot se propulsa cuando este es encendido.

Por ejemplo, se analizó experimentalmente la distribución de la velocidad de los hexbugs en un corral circular y en función de la agrupación [36]. Los hexbugs que se mueven en una parábola de plato también se han estudiado teórica y experimentalmente [3]. En esa investigación, se observó una dinámica de transición entre un estado de escalada y un estado circular de un hexbug [3]. Para explicar esa observación, un modelo simple que ignora la asimetría del robot, la inercia rotacional e introduce un efecto de autoalineación del vector de orientación de los bugs a su propio vector de velocidad, fue suficiente para describir su dinámica. Más recientemente, Leoni y col. [37] también analizó surfistas de alcanfor y rastreadores de hexbug bajo confinamiento. Destacan el efecto de la inercia sobre el comportamiento de esos sistemas activos.

Aunque ciertos trabajos en la literatura ya han tratado con hexbugs-nano, ninguno de ellos ha proporcionado predicciones teóricas para la dispersión de hexbugs-nano ni sus propiedades de velocidad cuadrática media. Además, ¿hasta qué punto un modelo simple es capaz de describir la dinámica de un hexbug-nano en una superficie con rugosidad? Para superar y responder a esto, caracterizamos los robots hexbugs-nano que se mueven en una parábola de plato y encontramos su difusión, velocidad cuadrática media (MSS), ángulo medio, desplazamiento angular cuadrático medio (MSAD) y distribuciones de probabilidad radial y de velocidad. Observamos que para el sistema actual, un modelo que considera la inercia traslacional pero que ignora el momento de inercia, surge para describir la dinámica de los robots en buena medida, y que un mecanismo de autoalineación [30] de su vector de orientación hacia su velocidad no reproduce los experimentos. En cambio, la inclusión de una torca externa constante en la dinámica de orientación proporciona una descripción más apropiada. También se realizan simulaciones de dinámica de Langevin y se observa una buena concordancia



cia entre teoría, simulaciones y experimentos. Este trabajo muestra que un simple hexbug-nano puede usarse como un sistema macroscópico para estudiar propiedades novedosas en materia activa. Partiendo de esta configuración es válido pensar que los robots se pueden describir con mono-polos de fuerza, pero esta configuración también se puede pensar como un gas inercial que no interactúa confinado a un pozo armónico. A partir de esa imagen, las ideas de presiones de nado y Reynolds son relevantes, ya que en trabajos anteriores se han obtenido esas cantidades de forma experimental o teórica para sistemas con partículas que no interactúan [38, 39, 34, 35]. De hecho, en [35] se hace una extensión de la ecuación del gas ideal para el caso de partículas activas estocásticas con inercia que no interactúan.

El presente estudio está organizado de la siguiente manera: En la Sección 2, describimos y realizamos el experimento. Aquí también se lleva a cabo un análisis de la dinámica angular. La Sección 3 describe el modelo matemático empleado, presenta los tiempos de relajación característicos y los números de Stokes que posee el sistema, y proporciona expresiones analíticas para el desplazamiento cuadrático medio y la velocidad cuadrática media del sistema. También se realiza una comparación entre números, experimentos y teoría. La sección 4 ofrece, tanto experimental como numéricamente, las funciones de distribución de probabilidad radial y de velocidad del sistema. Las discusiones y conclusiones se ofrecen en el capítulo 5.

## 3.2. Experimento

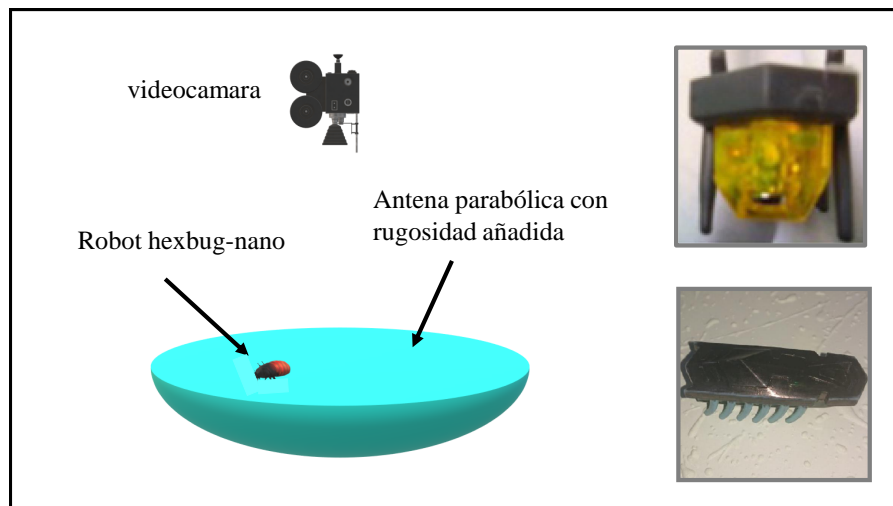


Figura 3.2: De izquierda a derecha y en el sentido de las agujas del reloj, esquema de la configuración experimental, una vista trasera de un hexbug mostrando sus dos patas traseras, claramente una es más delgada; y una foto del robot hexbug-nano sobre la antena en donde se puede observar la aspereza añadida.

Nuestro sistema consta de robots de juguete autopropulsados llamados hexbugs-nano [2] que se mueven sobre una antena parabólica y cuyo movimiento se ve perturbado por la rugosidad estocástica de la superficie, ver por ejemplo la Figura 3.2. De aquí en adelante de vez en cuando se introducirán los términos hexbug y bug, para referirnos al hexbug-nano, esto con el fin de no ser muy repetitivo en el desarrollo del texto. Para caracterizar este sistema, se registró y analizó el movimiento de 100 realizaciones. Para evitar grandes variaciones en la velocidad de propulsión de los hexbugs debido a la descarga de la batería, se utilizaron cinco hexbugs-nano, que se intercambiaron cada 5 mediciones hasta completar las 100 realizaciones. Fueron pintados de negro para facilitar su identificación. Un hexbug-nano tiene una masa de  $M = 0.0072$  Kg incluida la batería, y unas dimensiones de  $4.32 \text{ cm} \times 1.35 \text{ cm} \times 1.5 \text{ cm}$ . Esta partícula estaba confinada a un plato parabólico de  $56 \text{ cm}$  de diámetro,  $5.25 \text{ cm}$  de profundidad y con una constante restitutiva efectiva, que es función de la geometría y gravedad de la parábola del plato, de  $k = 0.09 \text{ Kg/s}^2$ . La superficie parabólica se pintó de blanco y se cubrió con una mezcla de relleno de plástico Color Car®, mezclado con diluyente y catalizador al 2%, el cual se salpicó aleatoriamente sobre toda su superficie y se dejó secar por un día. Las rugosidades se añadieron de manera aleatoria con el fin de que al moverse el hexbug se topase con estas asperezas y que la combinación de la vibración del robot con las rugosidades esparcidas aleatoriamente en la superficie hiciera que el robot emulara un movimiento aleatorio. La Figura 3.2 muestra la configuración experimental y un hexbug típico, también se puede apreciar la rugosidad final de la superficie.

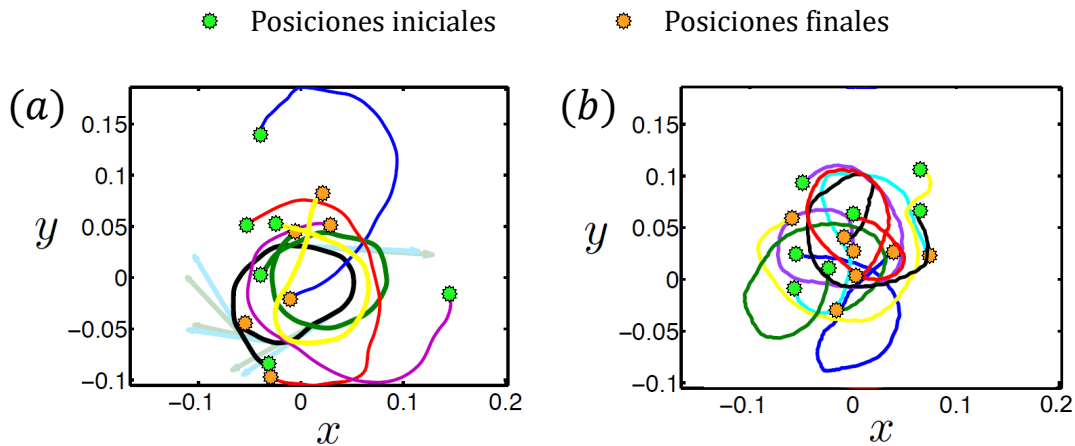


Figura 3.3: (a) Rutas típicas de seis realizaciones numéricas durante 2.4 segundos. Los vectores de velocidad y orientación para el caso de la trayectoria negra se muestran con flechas azul claro y verde claro, respectivamente. (b), Caminos típicos de siete realizaciones experimentales durante 2.4 segundos. Las posiciones iniciales en ambas figuras se muestran con un punto verde claro y las posiciones finales con un punto naranja.

Nuestros 100 experimentos grabados se analizaron típicamente en 7214 fotogramas ( $\sim 2$  min), y no se requirió más grabación ya que se alcanzó un estado estable en menos de dos minutos. Los experimentos se grabaron con una videocámara Sony HandyCam y se tomaron a 30 fps en formato AVI entrelazado. Durante el proceso de descompresión, utilizamos un filtro para separar los fotogramas pares e impares; así obtuvimos una resolución de tiempo de  $1/60$  s. Mediante el uso de ImageJ y su complemento Mosaic, obtuvimos los caminos de las partículas [40], algunos de ellos ejemplificados en la Fig. 3.3. La Figura 3.3 (a) muestra seis caminos durante 2.4 segundos obtenidos de las simulaciones (ver más abajo para valores específicos de los parámetros utilizados), mientras que en la figura 3.3 (b) se muestran siete trayectorias experimentales y durante la misma cantidad de tiempo. Estas figuras comparten varias características. Se puede ver, por ejemplo, que en ambas figuras hay una rotación intrínseca en el sistema (en sentido horario) y una distancia recorrida similar durante los 2.4 segundos seleccionados. Para mostrar esto, la figura 3.3 (a) indica la orientación instantánea y los vectores de velocidad de una trayectoria dada (línea negra sólida). Estos vectores ilustran la existencia de una rotación en el sentido de las agujas del reloj y que, para este sistema, los vectores de orientación y velocidad están casi alineados durante todo el tiempo. La alineación entre estos vectores no ocurre necesariamente en sistemas en los que la inercia de traslación y de rotación son importantes, como se informó recientemente en [35]. Por lo tanto, esta observación sugiere que el momento de inercia en el sistema es pequeño y puede despreciarse.

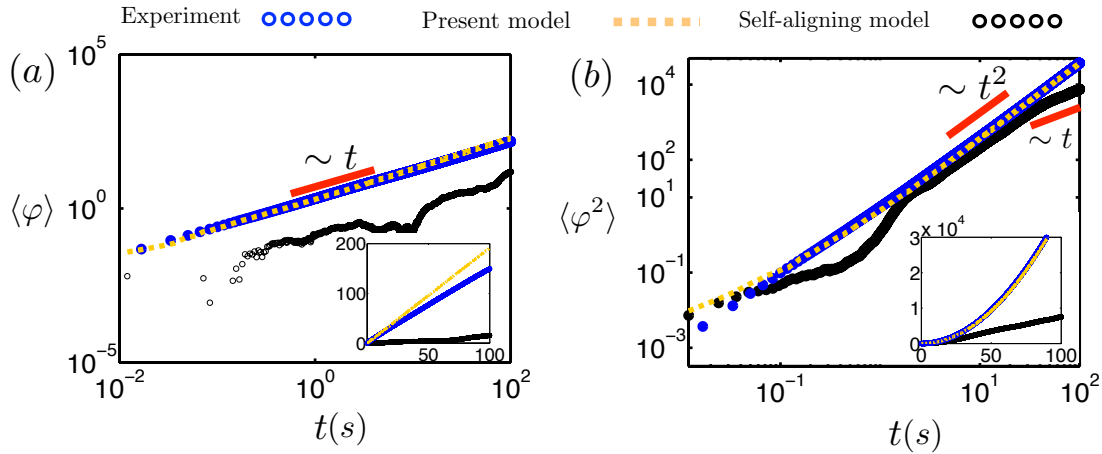


Figura 3.4: (a), Medición experimental del ángulo medio en función del tiempo en 100 realizaciones (círculos azules). Se presenta el modelo rotacional añadiendo una torca constante (línea discontinua naranja) y simulaciones del modelo rotacional autoalineable [3] (círculos negros). Recuadro: Misma medida sin escala logarítmica. (b), Medición experimental del desplazamiento angular cuadrático medio sobre 100 realizaciones (círculos azules). Se muestra el modelo rotacional añadiendo una torca constante (línea discontinua naranja) y simulaciones del modelo rotacional autoalineable [3] (círculos negros). Recuadro: Misma medida sin escala logarítmica.

Las trayectorias registradas se utilizaron para obtener el ángulo medio, el desplazamiento angular cuadrático medio, el desplazamiento cuadrático medio y las curvas de velocidad cuadrática media utilizando los programas que diseñamos. En particular, los resultados para el ángulo de orientación medio y el desplazamiento angular cuadrático medio se muestran en la Figura 3.4, donde los experimentos se representan en círculos azules. El ángulo de orientación es el ángulo que forma el robot al girar respecto a su centro de masa y se define como  $\Delta\varphi = \varphi - \varphi_0$  donde  $\varphi_0$  es el ángulo de orientación inicial. Se puede apreciar que el ángulo medio,  $\langle\varphi\rangle$ , tiene una tendencia lineal con respecto al tiempo. Además, su MSAD,  $\langle\varphi^2\rangle$ , muestra una tendencia cuadrática con respecto al tiempo. Esto último nos llevó a incluir una torca constante en el modelo que produce una velocidad angular constante,  $\omega$ , en los robots, expresamente,  $\langle\varphi\rangle = |\omega|t$  y una MSAD,  $\langle\varphi^2\rangle = \omega^2 t^2$ . A partir de los experimentos, también se determina el valor de la velocidad angular que está alrededor de  $\omega = -1.9 \text{ s}^{-1}$  (se adopta la convención de que el giro en sentido horario se toma con signo negativo y en sentido antihorario se toma con signo positivo). Este valor reproduce exactamente el comportamiento del MSAD como se muestra en el recuadro de la figura 3.4 (b) donde la expresión  $\langle\varphi^2\rangle = \omega^2 t^2$  se muestra como una línea discontinua naranja. Para el ángulo medio, y según la Fig. 3.4 (a), el modelo  $\langle\varphi\rangle = |\omega|t$  reproduce aproximadamente los experimentos. Después de analizar cuidadosamente la estructura y la dinámica de los hexbugs, además de realizar algunos experimentos; podemos decir que la persistente velocidad angular en el sentido de las agujas del reloj de un hexbug se debe a dos mecanismos: 1) Una asimetría del centro de masa de los bugs con respecto a la dirección normal, debido a una pata trasera más delgada. Esta asimetría genera una torca en el sentido de las agujas del reloj ya que las patas delanteras actúan como punto de pivote. 2) Tercera ley de Newton aplicada al estator y al rotor del hexbug. Mientras que el rotor se mueve en el sentido de las agujas del reloj, el estator lo hace en la dirección opuesta, pero su torca de reacción con el suelo hace que el bug gire finalmente en el sentido de las agujas del reloj.

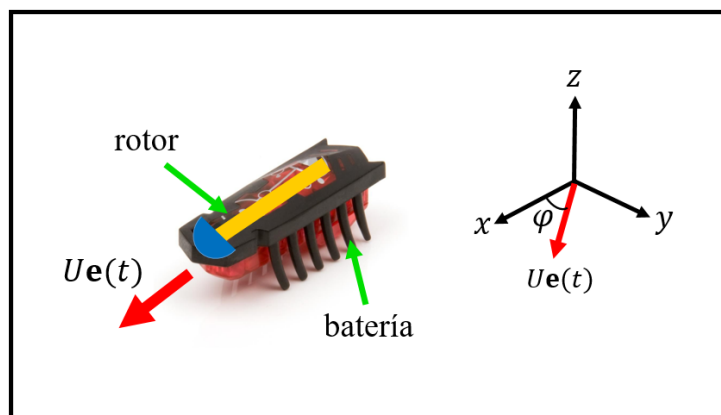


Figura 3.5: Imagen de hexbug-nano con la ubicación de sus componentes principales y de su vector director. En la misma figura también se puede observar el ángulo de orientación  $\varphi$ .

Para probar este efecto y despreciar el mecanismo de patas delgadas anterior, los bugs se colocaron boca abajo (para lograr el mismo grosor de patas, tenga en cuenta que estos robots de juguete tienen patas del mismo grosor en la espalda) en la parábola y se cambió la polaridad de la batería, claramente se observó una torca en función de la polaridad, confirmando así este segundo mecanismo.

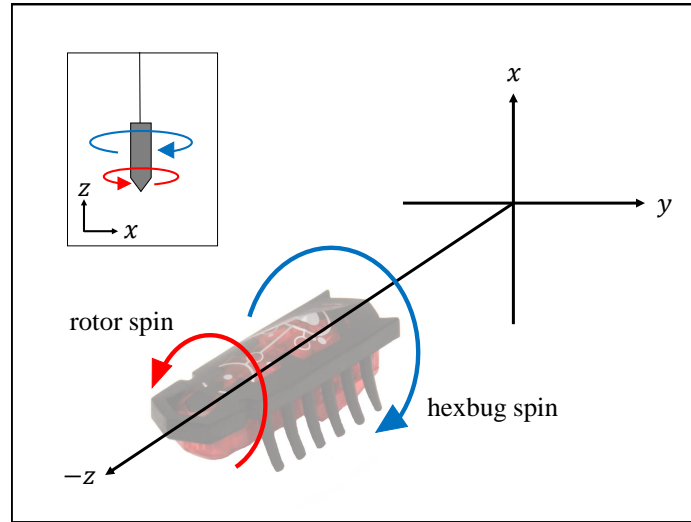


Figura 3.6: Recuadro superior izquierdo: Esquema de un experimento en el que un hexbug se cuelga utilizando un hilo para observar el giro del bug, que resultó ser en sentido contrario al giro del motor. El esquema grande representa el experimento visto desde el suelo que puede intuirse por los ejes coordenados.

Además, la figura 3.4 muestra las simulaciones numéricas de un modelo de orientación alternativo (llamado modelo de autoalineación) que satisface  $d\varphi = \lambda[-\sin(\varphi)v_x + \cos(\varphi)v_y]dt + \sqrt{2D_R}dW$ , que se propuso recientemente [3]. Aquí,  $\varphi$  representa la coordenada angular,  $v_x$  y  $v_y$  son los componentes de velocidad de la partícula,  $\lambda$  es un parámetro que caracteriza la fuerza de la autoalineación,  $D_R$  es una difusividad rotacional y  $W$  representa un proceso de Wiener estándar. Básicamente, este modelo fuerza al vector de orientación de los hexbugs a rotar hacia su vector de velocidad. Para las simulaciones, proponemos  $\lambda = 100 \text{ m}^{-1}$  y  $D_R = 0.3 \text{ s}^{-1}$ , este último valor se tomó de nuestros experimentos. Otros valores de  $\lambda = \{0.1, 100\} \text{ m}^{-1}$  también se analizaron pero sin éxito. Se puede apreciar en la Figura 3.4 (a) (ver círculos negros) que este modelo es incapaz de crear una velocidad angular persistente en el sentido de las agujas del reloj. Además, la figura 3.4 (b) indica (círculos negros) que su MSAD se mueve de una dependencia temporal cuadrática a una dependencia lineal que no es lo que observamos. Los recuadros de la Fig. 3.4 muestran las mismas variables sin una escala logarítmica. Aquí, la diferencia entre los experimentos y el modelo de autoalineación es más notable.

En este punto y después de ejecutar varias simulaciones para  $\lambda > 100 \text{ m}^{-1}$ , observamos que el mecanismo de autoalineación genera una torca constante, pero puede

ser negativo (en el sentido de las agujas del reloj) o positivo (en el sentido contrario a las agujas del reloj), que es la razón de una media cero. en el modelo autoalineable (ver recuadro en la Fig. 3.4 (a)). La dinámica de rotación de un hexbug-nano presenta una rotación persistente en el sentido de las agujas del reloj, de ahí la diferencia con el modelo autoalineante.

### 3.3. Caracterización

#### 3.3.1. Ecuaciones de movimiento

Basado en las observaciones de la Fig. 3.4, debido a que el momento de inercia ( $I$ ) de una barra delgada de masa  $M = 0.0072$  Kg y longitud típica  $L = 0.04$  m es  $\sim ML^2 \sim 10^{-5}$  Kgm<sup>2</sup>, y debido a que la dirección observada entre los vectores de orientación y velocidad de los robots es casi alineada, proponemos un modelo estocástico que considera la inercia traslacional pero descuida el momento de inercia de los hexbugs. Tomando como inspiración propuestas previas para describir caminantes granulares [41] y robots activos [4, 3], las ecuaciones de movimiento correspondientes aplicando la segunda ley de newton son

$$M \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = -R_U \mathbf{v} + R_U U \mathbf{e} - k \mathbf{x} \quad (3.1)$$

$$\dot{\varphi} = \omega + \sqrt{2D_R} \xi \quad (3.2)$$

estas ecuaciones se pueden reescribir como

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{R_U}{M} \mathbf{v} dt + \frac{R_U U}{M} \mathbf{e} - \frac{k}{M} \mathbf{x} \quad (3.3)$$

$$d\varphi = \omega dt + \sqrt{2D_R} dW \quad (3.4)$$

a su vez estas se pueden reescribir como sigue

$$d\mathbf{v} = -\frac{1}{\tau_M} \mathbf{v} dt + \frac{U}{\tau_M} \mathbf{e} dt - \frac{1}{\tau_k} \mathbf{x} dt \quad (3.5)$$

$$d\varphi = \omega dt + \sqrt{2D_R} dW \quad (3.6)$$

Aquí  $\mathbf{x}(t)$  representa el vector de posición de proyección instantánea,  $\mathbf{v}(t)$  es la velocidad de traslación,  $U$  es la velocidad de propulsión,  $\varphi(t)$  es la posición angular instantánea en la dirección de propulsión, con origen en el centro de la partícula,  $\mathbf{e}(t) = [\cos \varphi(t), \sin \varphi(t)]$  es el vector unitario de orientación instantánea,  $\omega$  es una velocidad angular intrínseca de los hexbugs,  $D_R$  es una difusividad rotacional,  $W$  representa un proceso de Wiener estándar; mientras que  $\tau_M = M/R_U$ ,  $\tau_R = 1/D_R$ ,  $\tau_k = \sqrt{M/k}$ , y  $\tau_\omega = 1/\omega$  representan los tiempos de relajación del sistema. Usando estas escalas de tiempo, construimos los siguientes números adimensionales de Stokes

$S_T = \tau_M/\tau_R$ ,  $S_L = \tau_M/\tau_k$ , y  $S_\omega = \tau_M/\tau_\omega$  que será de utilidad durante el tratamiento analítico.

Cabe mencionar que no se puede descartar el hecho de que la aspereza añadida sugiera un desorden espacial [42], sin embargo, como nuestro modelo es una primera propuesta tomamos el efecto de la rugosidad sobre el movimiento del hexbug como un ruido blanco. Sería interesante en un futuro analizar modelos de desorden espacial con los datos experimentales.

### Ecuación rotacional

Considerando un marco de referencia fijo en el centro de masa del hexbug-nano, el cual rota junto con el robot, es posible plantear una ecuación de movimiento para el vector director  $\mathbf{e}$  que relacione el marco de referencia de laboratorio y el marco montado en el hexbug, esta relación viene dada por

$$\frac{d\mathbf{e}}{dt} = \Omega \times \mathbf{e} \quad (3.7)$$

con

$$\Omega(t) = \frac{d\varphi(t)}{dt} \quad (3.8)$$

Como se puede notar  $\Omega(t)$  es la velocidad angular del robot. Ahora veamos que implica la Ec. (3.7), tomando en cuenta que  $\Omega$  solo tiene componente en  $\hat{k}$ , si se hace el producto vectorial resulta lo siguiente

$$\Omega \hat{k} \times \mathbf{e} = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 0 & 0 & \Omega \\ e_1 & e_2 & 0 \end{vmatrix} = \hat{i}[-e_2\Omega] - \hat{j}[-e_1\Omega]$$

Por lo tanto si expresamos (3.7) en componentes se tiene

$$\frac{de_1}{dt} = -e_2\Omega \quad (3.9)$$

$$\frac{de_2}{dt} = e_1\Omega \quad (3.10)$$

pero si derivamos las componentes del vector director se obtienen

$$\frac{de_1}{dt} = -\sin\varphi \frac{d\varphi}{dt} = -e_2\Omega \quad (3.11)$$

$$\frac{de_2}{dt} = \cos\varphi \frac{d\varphi}{dt} = e_1\Omega \quad (3.12)$$

Como se puede ver solo se llega a la misma expresión que se obtiene de (3.7), por ello solo interesa la ecuación

$$\frac{d\varphi}{dt} = \Omega \quad (3.13)$$

que es simplemente la definición de velocidad angular. En el caso libre sobreamortiguado  $\Omega$  sería igual a la torca estocástica debida al medio, en nuestro caso la velocidad angular está dada por (3.2) quedando

$$\Omega = \omega + \sqrt{2D_R\xi} \quad (3.14)$$

### 3.3.2. Solución a las ecuaciones de movimiento

La ecuación de movimiento traslacional se resuelve reescribiéndola de la siguiente manera

$$M \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} + R_U \frac{d\mathbf{x}}{dt} + k\mathbf{x} = R_U U \mathbf{e} \quad (3.15)$$

Lo anterior es una ecuación diferencial no homogénea de segundo orden, cuya solución general está dada por la suma de la solución de la ecuación diferencial homogénea asociada  $\mathbf{x}_h$  y una solución particular de la ecuación diferencial no homogénea  $\mathbf{x}_p$ , es decir,

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_h + \mathbf{x}_p \quad (3.16)$$

La ecuación asociada es una ecuación lineal homogénea de segundo orden con coeficientes constantes cuya solución general es de la forma

$$\mathbf{x}_h = \mathbf{c}_1 x_{h,1}(t) + \mathbf{c}_2 x_{h,2}(t) \quad (3.17)$$

donde  $x_{h,1}(t)$  y  $x_{h,2}(t)$  forman un conjunto fundamental de soluciones, mientras que  $c_1$  y  $c_2$  son constantes definidas por las condiciones iniciales. Para calcular la solución de la ecuación homogénea asociada para nuestro caso, primero la escribimos de forma explícita

$$M \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} + R_U \frac{d\mathbf{x}}{dt} + k\mathbf{x} = 0 \quad (3.18)$$

expresando de forma conveniente la ecuación anterior se obtiene

$$\frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} + 2\lambda \frac{d\mathbf{x}}{dt} + \omega^2 \mathbf{x} = 0 \quad (3.19)$$

donde  $2\lambda \equiv \frac{R_U}{M}$  y  $\omega^2 \equiv \frac{k}{M}$ , a continuación obtenemos nuestra ecuación auxiliar.

$$m^2 + 2\lambda m + \omega^2 = 0 \quad (3.20)$$

Las raíces correspondientes en términos de los números de Stokes son

$$m_1 = \frac{-1 + \sqrt{1 - 4S_L^2}}{2\tau_M} \quad (3.21)$$

$$m_2 = \frac{-1 - \sqrt{1 - 4S_L^2}}{2\tau_M} \quad (3.22)$$



Tomando en cuenta que dependiendo del valor de  $S_L$  la raíz puede ser real o imaginaria, se llega a las siguientes tres formas de la ecuación (3.17). Caso 1:  $m_1$  y  $m_2$  son reales y diferentes, lo que implica que  $0 < S_L < 1/2$ . Esta situación se denomina “caso trampa débil”. Caso 2:  $m_1 = m_2 = -1/2\tau_M$ , real e igual, lo que implica que  $S_L = 1/2$ . Caso 3:  $m_1$  y  $m_2$  son números complejos conjugados ( $-\frac{1}{2\tau_M} \pm i(1/2\tau_M)\sqrt{4S_L^2 - 1}$ ), lo que implica que  $S_L > 1/2$ . Esta situación se denomina “caso trampa fuerte”.

La solución particular para la ecuación (3.15) se obtiene utilizando el método de variación de parámetros que necesita la solución de la ecuación homogénea (3.17) y el Wronskiano  $W(x_{h,1}(t), x_{h,2}(t))$ . A continuación se precede a calcular la solución particular para el caso trampa débil, esto quiere decir que tomamos  $0 < S_L < 1/2$ , por lo que la solución correspondiente a nuestra ecuación (3.19) es

$$\mathbf{x}_h(t) = \mathbf{c}_1 e^{m_1 t} + \mathbf{c}_2 e^{m_2 t} \quad (3.23)$$

escrita en otra forma es

$$\mathbf{x}_h(t) = e^{\frac{t}{2\tau_M}} [\mathbf{c}_1 e^{\beta_1 t} + \mathbf{c}_2 e^{\beta_2 t}] \quad (3.24)$$

donde

$$\beta_1 = -1 + \sqrt{1 - 4S_L^2} \quad (3.25)$$

$$\beta_2 = -1 - \sqrt{1 - 4S_L^2} \quad (3.26)$$

Ahora calculamos la solución particular para lo cual reescribimos la ecuación (3.15) como se puede apreciar

$$\ddot{\mathbf{x}} + P(t)\dot{\mathbf{x}} + Q(t)\mathbf{x} = \mathbf{G}(t) \quad (3.27)$$

donde  $P(t) = \frac{R_U}{M}$ ,  $Q(t) = \frac{k}{M}$  y  $\mathbf{G}(t) = \frac{1}{M}R_U U \mathbf{e}$ . La solución será de la forma

$$\mathbf{x}_p(t) = \mathbf{u}_1(t)x_{h,1}(t) + \mathbf{u}_2(t)x_{h,2}(t) \quad (3.28)$$

está solución debe satisfacer dos ecuaciones

$$x_{h,1}\dot{\mathbf{u}}_1 + x_{h,2}\dot{\mathbf{u}}_2 = 0 \quad (3.29)$$

$$\dot{x}_{h,1}\dot{\mathbf{u}}_1 + \dot{x}_{h,2}\dot{\mathbf{u}}_2 = \mathbf{G}(t) \quad (3.30)$$

lo anterior se puede expresar en términos de determinantes:

$$\dot{\mathbf{u}}_1 = \frac{W_1}{W} = -\frac{x_{h,2}\mathbf{G}(t)}{W} \quad (3.31)$$

$$\dot{\mathbf{u}}_2 = \frac{W_2}{W} = \frac{x_{h,1}\mathbf{G}(t)}{W} \quad (3.32)$$

donde

$$W = \begin{vmatrix} x_{h,1} & x_{h,2} \\ \dot{x}_{h,1} & \dot{x}_{h,2} \end{vmatrix}, W_1 = \begin{vmatrix} 0 & x_{h,2} \\ \mathbf{G}(t) & \dot{x}_{h,2} \end{vmatrix}, W_2 = \begin{vmatrix} x_{h,1} & 0 \\ \dot{x}_{h,1} & \mathbf{G}(t) \end{vmatrix}.$$

De la solución complementaria homogénea (3.23) tenemos que

$$x_{h,1} = e^{m_1 t}; x_{h,2} = e^{m_2 t}; \dot{x}_{h,1} = m_1 e^{m_1 t}; \dot{x}_{h,2} = m_2 e^{m_2 t}$$

Se procede a calcular los determinantes

$$W = \begin{vmatrix} e^{m_1 t} & e^{m_2 t} \\ m_1 e^{m_1 t} & m_2 e^{m_2 t} \end{vmatrix} = (m_2 - m_1) e^{(m_2 + m_1)t} \quad (3.33)$$

$$W_1 = \begin{vmatrix} 0 & e^{m_2 t} \\ \mathbf{G}(t) & m_2 e^{m_2 t} \end{vmatrix} = -e^{m_2 t} \mathbf{G}(t) \quad (3.34)$$

$$W_2 = \begin{vmatrix} e^{m_1 t} & 0 \\ m_1 e^{m_1 t} & \mathbf{G}(t) \end{vmatrix} = e^{m_1 t} \mathbf{G}(t) \quad (3.35)$$

para obtener la solución particular  $\mathbf{x}_p$  es necesario calcular  $\mathbf{u}_1$  y  $\mathbf{u}_2$ , con las determinantes calculadas tenemos que

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{u}}_1(t) &= -\frac{e^{m_2 t} \mathbf{G}(t)}{(m_2 - m_1) e^{(m_2 + m_1)t}} \\ &= -\frac{e^{-m_1 t} \mathbf{G}(t)}{m_2 - m_1} \end{aligned} \quad (3.36)$$

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{u}}_2(t) &= \frac{e^{m_1 t} \mathbf{G}(t)}{(m_2 - m_1) e^{(m_2 + m_1)t}} \\ &= \frac{e^{-m_2 t} \mathbf{G}(t)}{m_2 - m_1} \end{aligned} \quad (3.37)$$

Integrando obtenemos las expresiones que necesitamos.

$$\mathbf{u}_1(t) = -\int_0^t \frac{e^{-m_1 t_1} \mathbf{G}(t_1)}{m_2 - m_1} dt_1 \quad (3.38)$$

$$\mathbf{u}_2(t) = \int_0^t \frac{e^{-m_2 t_1} \mathbf{G}(t_1)}{m_2 - m_1} dt_1 \quad (3.39)$$

Al sustituir lo calculado en (3.28) se obtiene la solución particular la cual es

$$\mathbf{x}_p(t) = \left[ -\int_0^t \frac{e^{-m_1 t_1} \mathbf{G}(t_1)}{m_2 - m_1} dt_1 \right] e^{m_1 t} + \left[ \int_0^t \frac{e^{-m_2 t_1} \mathbf{G}(t_1)}{m_2 - m_1} dt_1 \right] e^{m_2 t} \quad (3.40)$$

Por tanto, la solución general que es la suma de la solución de la ecuación homogénea asocia más la particular es

$$\begin{aligned}
 \mathbf{x}(t) &= \mathbf{c}_1 e^{m_1 t} + \mathbf{c}_2 e^{m_2 t} + \left[ - \int_0^t \frac{e^{-m_1 t_1} \mathbf{G}(t_1)}{m_2 - m_1} dt_1 \right] e^{m_1 t} + \left[ \int_0^t \frac{e^{-m_2 t_1} \mathbf{G}(t_1)}{m_2 - m_1} dt_1 \right] e^{m_2 t} \\
 &= \mathbf{c}_1 e^{m_1 t} + \mathbf{c}_2 e^{m_2 t} - \int_0^t \frac{e^{-m_1(t_1-t)} \mathbf{G}(t_1)}{m_2 - m_1} dt_1 + \int_0^t \frac{e^{-m_2(t_1-t)} \mathbf{G}(t_1)}{m_2 - m_1} dt_1 \quad (3.41)
 \end{aligned}$$

pero se puede expresar de otra forma el denominador de los dos últimos términos

$$\begin{aligned}
 m_2 - m_1 &= \frac{1}{2\tau_M} [\beta_1 - \beta_2] = \frac{1}{2\tau_M} \left[ -1 + \sqrt{1 - 4S_L^2} - \left( -1 - \sqrt{1 - 4S_L^2} \right) \right] \\
 &= \frac{1}{2\tau_M} \left[ -1 + \sqrt{1 - 4S_L^2} + 1 + \sqrt{1 - 4S_L^2} \right] \\
 &= \frac{\sqrt{1 - 4S_L^2}}{\tau_M}
 \end{aligned}$$

sustituyendo lo anterior, los valores de  $m_1$ ,  $m_2$  y  $\mathbf{G}(t_1)$  se llega a

$$\begin{aligned}
 \mathbf{x}(t) &= \mathbf{c}_1 e^{\frac{\beta_1}{2\tau_M} t} + \mathbf{c}_2 e^{\frac{\beta_2}{2\tau_M} t} + \frac{\tau_M}{\sqrt{1 - 4S_L^2}} \int_0^t \left[ e^{-\frac{\beta_1}{2\tau_M}(t_1-t)} - e^{-\frac{\beta_2}{2\tau_M}(t_1-t)} \right] \frac{R_U U \mathbf{e}(t_1)}{M} dt_1 \\
 &= \mathbf{c}_1 e^{\frac{\beta_1}{2\tau_M} t} + \mathbf{c}_2 e^{\frac{\beta_2}{2\tau_M} t} + \frac{U}{\sqrt{1 - 4S_L^2}} \int_0^t \left[ e^{-\frac{\beta_1}{2\tau_M}(t_1-t)} - e^{-\frac{\beta_2}{2\tau_M}(t_1-t)} \right] \mathbf{e}(t_1) dt_1 \quad (3.42)
 \end{aligned}$$

Para encontrar la solución de los otros dos casos ( $S_L = 1/2$  y  $S_L > 1/2$ ) también se utiliza el método de variación de parámetros y se procede de forma similar a como se hizo en el caso trampa débil, en forma resumida presentamos la solución para cada uno de los casos.

**Caso 1:** con  $0 < S_L < 1/2$

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{c}_1 e^{\frac{\beta_1}{2\tau_M} t} + \mathbf{c}_2 e^{\frac{\beta_2}{2\tau_M} t} + \frac{U}{\sqrt{1 - 4S_L^2}} \int_0^t \left[ e^{-\frac{\beta_1}{2\tau_M}(t_1-t)} - e^{-\frac{\beta_2}{2\tau_M}(t_1-t)} \right] \mathbf{e}(t_1) dt_1 \quad (3.43)$$

**Caso 2:** con  $S_L = 1/2$

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{c}_1 e^{-\frac{t}{2\tau_M}} + \mathbf{c}_2 t e^{-\frac{t}{2\tau_M}} + \frac{U}{\tau_M} \int_0^t \mathbf{e}(t_1) (t - t_1) e^{-\frac{1}{2\tau_M}(t-t_1)} dt_1 \quad (3.44)$$

**Caso 3:** con  $S_L > 1/2$

$$\begin{aligned} \mathbf{x}(t) = & \mathbf{c}_1 e^{-\frac{t}{2\tau_M}} \cos(\sigma t) + \mathbf{c}_2 e^{-\frac{t}{2\tau_M}} \sin(\sigma t) \\ & + \frac{2U}{\sqrt{4S_L^2 - 1}} \int_0^t \mathbf{e}(t_1) \left[ -e^{-\frac{1}{2\tau_M}(t-t_1)} \cos \sigma t \sin \sigma t_1 \right. \\ & \left. + e^{-\frac{t}{2\tau_M}(t-t_1)} \sin \sigma t \cos \sigma t_1 \right] dt_1 \end{aligned} \quad (3.45)$$

donde  $\sigma = (1/2\tau_M)\sqrt{4S_L^2 - 1}$ . La velocidad se obtiene derivando la posición  $\mathbf{v} = d\mathbf{x}/dt$  en cada caso.

### 3.3.3. MSD y MSS del sistema

Comencemos calculando  $S_L = \tau_M/\tau_k$ . Realizando simulaciones de Langevin a las Ecs. (3.5) y (3.6), encontramos que los tiempos de relajación  $\tau_M = 0.01$  s y  $\tau_R = 3.33$  s coinciden con los resultados experimentales. Por lo tanto, empleamos estos dos tiempos de relajación para generar una simulación de la dinámica de un bug. Esta película se compara con una realización experimental, y la dinámica observada es notablemente muy similar. Además, de la geometría de la parábola del plato se tiene que  $\tau_k = 0.276$  s. Por lo tanto, para nuestro sistema  $S_L = 0.033$ , lo que implica una condición de trampa débil ( $0 < S_L < 1/2$ ). Por tanto, las soluciones a las Ecs. (3.5) y (3.6) son

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{c}_1 e^{\frac{\beta_1}{2\tau_M}t} + \mathbf{c}_2 e^{\frac{\beta_2}{2\tau_M}t} + \frac{U}{\sqrt{1 - 4S_L^2}} \int_0^t \left[ e^{-\frac{\beta_1}{2\tau_M}(t_1-t)} - e^{-\frac{\beta_2}{2\tau_M}(t_1-t)} \right] \mathbf{e}(t_1) dt_1 \quad (3.46)$$

$$\varphi(t) = \omega t + \sqrt{2D_R} \int_0^t [1 - e^{-(t-t_1)/\tau_R}] dW \quad (3.47)$$

donde  $\beta_1$  y  $\beta_2$  están definidas por (3.25) y (3.26), además el resultado para  $\varphi(t)$  ya es conocido. A partir de la expresión para la posición es posible conocer la velocidad del hexbug derivando  $\mathbf{x}(t)$  y para ello se utiliza la regla de Leibniz, que establece la siguiente relación

$$\frac{d}{dt} \left( \int_{a(t)}^{b(t)} F(z, t) dz \right) = F(b(t), t) \frac{db(t)}{dt} - F(a(t), t) \frac{da(t)}{dt} + \int_{a(t)}^{b(t)} \frac{\partial F(z, t)}{\partial t} dz$$

utilizando esta regla de derivación se obtiene la velocidad  $\mathbf{v}(t)$ . Aplicando las condiciones iniciales  $\mathbf{x}(t=0) = 0$  y  $\mathbf{v}(t=0) = 0$ , se obtiene que la expresión para la posición, la velocidad y el ángulo de orientación para nuestro sistema están dadas por

$$\mathbf{x}(t) = \frac{U}{\sqrt{1-4S_L^2}} \int_0^t \left( e^{-\frac{\beta_1}{2\tau_M}(t_1-t)} - e^{-\frac{\beta_2}{2\tau_M}(t_1-t)} \right) \mathbf{e}(t_1) dt_1 \quad (3.48)$$

$$\mathbf{v}(t) = \frac{U}{2\tau_M \sqrt{1-4S_L^2}} \int_0^t \left( \beta_1 e^{-\frac{\beta_1}{2\tau_M}(t_1-t)} - \beta_2 e^{-\frac{\beta_2}{2\tau_M}(t_1-t)} \right) \mathbf{e}(t_1) dt_1 \quad (3.49)$$

$$\varphi(t) = \omega t + \sqrt{2D_R} \int_0^t [1 - e^{-(t-t_1)/\tau_R}] dW \quad (3.50)$$

Usando la ecuación (3.50), se puede probar [43, 44] que la función de correlación de orientación para este caso es

$$\langle \mathbf{e}(t) \cdot \mathbf{e}(t_1) \rangle = \cos[\omega(t-t_1)] e^{-\frac{1}{\tau_R}(t-t_1)} \quad (3.51)$$

Después de elevar al cuadrado la ecuación (3.48) y (3.49), aplicando el promedio de conjunto, empleando (3.51) y tomando el límite para tiempos largos ( $t \rightarrow \infty$ ), se puede demostrar que el desplazamiento cuadrático medio (MSD),  $\langle \mathbf{x} \cdot \mathbf{x} \rangle$ , y la velocidad cuadrática media (MSS),  $\langle \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \rangle$ , del sistema a largo plazo están dados por

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} \cdot \mathbf{x} \rangle &= \frac{2U^2\tau_M^2}{1-4S_L^2} \left\{ \frac{\beta_1 - 2S_T}{\beta_1 \left( (2S_T - \beta_1)^2 + 4S_\omega^2 \right)} \right. \\ &+ \frac{1}{(2S_T + \beta_1)^2 + 4S_\omega^2} \left( -\frac{2S_T}{\beta_1} - 1 + \frac{2(\beta_1^2 - 4S_T^2 + 4S_\omega^2)}{(\beta_1 - 2S_T)^2 + 4S_\omega^2} \right) \\ &+ \frac{\beta_2 - 2S_T}{\beta_2 \left( (2S_T - \beta_2)^2 + 4S_\omega^2 \right)} + \frac{1}{(2S_T + \beta_2)^2 + 4S_\omega^2} \left( -\frac{2S_T}{\beta_2} - 1 + \frac{2(\beta_2^2 - 4S_T^2 + 4S_\omega^2)}{(\beta_2 - 2S_T)^2 + 4S_\omega^2} \right) \\ &+ \frac{\beta_2 - 2S_T}{(2S_T - \beta_2)^2 + 4S_\omega^2} + \frac{1}{(2S_T + \beta_2)^2 + 4S_\omega^2} \left( \frac{(\beta_1 - 2S_T) \left( (2S_T + \beta_2)^2 + 4S_\omega^2 \right)}{(2S_T - \beta_1)^2 + 4S_\omega^2} \right) \\ &\left. + \frac{\beta_1 - 2S_T}{(2S_T - \beta_1)^2 + 4S_\omega^2} + \frac{1}{(2S_T + \beta_1)^2 + 4S_\omega^2} \left( \frac{(\beta_2 - 2S_T) \left( (2S_T + \beta_1)^2 + 4S_\omega^2 \right)}{(2S_T - \beta_2)^2 + 4S_\omega^2} \right) \right\} \end{aligned}$$

los términos sexto y octavo se pueden simplificar quedando lo siguiente

$$\langle \mathbf{x} \cdot \mathbf{x} \rangle = \frac{2U^2\tau_M^2}{1-4S_L^2} \left\{ \frac{\beta_1 - 2S_T}{\beta_1 \left( (2S_T - \beta_1)^2 + 4S_\omega^2 \right)} \right.$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{1}{(2S_T + \beta_1)^2 + 4S_\omega^2} \left( -\frac{2S_T}{\beta_1} - 1 + \frac{2(\beta_1^2 - 4S_T^2 + 4S_\omega^2)}{(\beta_1 - 2S_T)^2 + 4S_\omega^2} \right) \\
 & \quad + \frac{\beta_2 - 2S_T}{\beta_2 \left( (2S_T - \beta_2)^2 + 4S_\omega^2 \right)} \\
 & + \frac{1}{(2S_T + \beta_2)^2 + 4S_\omega^2} \left( -\frac{2S_T}{\beta_2} - 1 + \frac{2(\beta_2^2 - 4S_T^2 + 4S_\omega^2)}{(\beta_2 - 2S_T)^2 + 4S_\omega^2} \right) \\
 & \quad + \frac{\beta_2 - 2S_T}{(2S_T - \beta_2)^2 + 4S_\omega^2} + \frac{\beta_1 - 2S_T}{(2S_T - \beta_1)^2 + 4S_\omega^2} \\
 & \quad + \left. \frac{\beta_1 - 2S_T}{(2S_T - \beta_1)^2 + 4S_\omega^2} + \frac{\beta_2 - 2S_T}{(2S_T - \beta_2)^2 + 4S_\omega^2} \right\} \\
 & = \frac{2U^2\tau_M^2}{1 - 4S_L^2} \left\{ \frac{\beta_1 - 2S_T}{\beta_1 \left( (2S_T - \beta_1)^2 + 4S_\omega^2 \right)} \right. \\
 & + \frac{1}{(2S_T + \beta_1)^2 + 4S_\omega^2} \left( -\frac{2S_T}{\beta_1} - 1 + \frac{2(\beta_1^2 - 4S_T^2 + 4S_\omega^2)}{(\beta_1 - 2S_T)^2 + 4S_\omega^2} \right) \\
 & \quad + \frac{\beta_2 - 2S_T}{\beta_2 \left( (2S_T - \beta_2)^2 + 4S_\omega^2 \right)} \\
 & + \frac{1}{(2S_T + \beta_2)^2 + 4S_\omega^2} \left( -\frac{2S_T}{\beta_2} - 1 + \frac{2(\beta_2^2 - 4S_T^2 + 4S_\omega^2)}{(\beta_2 - 2S_T)^2 + 4S_\omega^2} \right) \\
 & \quad \left. + \frac{2(\beta_1 - 2S_T)}{(2S_T - \beta_1)^2 + 4S_\omega^2} + \frac{2(\beta_2 - 2S_T)}{(2S_T - \beta_2)^2 + 4S_\omega^2} \right\}
 \end{aligned}$$

la expresión anterior se puede simplificar aún más, de la siguiente manera

$$\langle \mathbf{x} \cdot \mathbf{x} \rangle = \frac{2U^2\tau_M^2}{1 - 4S_L^2} \sum_{i=1}^2 \left\{ \frac{\beta_i - 2S_T}{\beta_i \alpha_i^-} - \frac{2S_T}{\beta_i \alpha_i^+} - \frac{1}{\alpha_i^+} + \frac{2\gamma_i}{\alpha_i^+ \alpha_i^-} + \frac{2(\beta_i - 2S_T)}{\alpha_i^-} \right\} \quad (3.52)$$

donde definimos

$$\alpha_i^+ = (2S_T + \beta_i)^2 + 4S_\omega^2 \quad (3.53)$$

$$\alpha_i^- = (2S_T - \beta_i)^2 + 4S_\omega^2 \quad (3.54)$$

$$\gamma_i = \beta_i^2 - 4S_T^2 + 4S_\omega^2 \quad (3.55)$$

Ahora, la expresión para la rapidez cuadrática media para tiempos largos ( $t \rightarrow \infty$ ) es

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \rangle &= \frac{U^2}{1 - 4S_L^2} \left\{ \frac{\beta_1^2 - 2\beta_1 S_T}{2 \left( (2S_T - \beta_1)^2 + 4S_\omega^2 \right)} \right. \\
 &+ \frac{1}{2 \left( (2S_T + \beta_1)^2 + 4S_\omega^2 \right)} \left( -2\beta_1 S_T - \beta_1^2 + \frac{2\beta_1^2 (\beta_1^2 - 4S_T^2 + 4S_\omega^2)}{(\beta_1 - 2S_T)^2 + 4S_\omega^2} \right) \\
 &\quad + \frac{\beta_2^2 - 2\beta_2 S_T}{2 \left( (2S_T - \beta_2)^2 + 4S_\omega^2 \right)} \\
 &+ \frac{1}{2 \left( (2S_T + \beta_2)^2 + 4S_\omega^2 \right)} \left( -2\beta_2 S_T - \beta_2^2 + \frac{2\beta_2^2 (\beta_2^2 - 4S_T^2 + 4S_\omega^2)}{(\beta_2 - 2S_T)^2 + 4S_\omega^2} \right) \\
 &+ \frac{2S_L^2 (\beta_2 - 2S_T)}{(2S_T - \beta_2)^2 + 4S_\omega^2} + \frac{2S_L^2}{(2S_T + \beta_2)^2 + 4S_\omega^2} \left( \frac{(\beta_1 - 2S_T) \left( (2S_T + \beta_2)^2 + 4S_\omega^2 \right)}{(2S_T - \beta_1)^2 + 4S_\omega^2} \right) \\
 &\left. + \frac{2S_L^2 (\beta_1 - 2S_T)}{(2S_T - \beta_1)^2 + 4S_\omega^2} + \frac{2S_L^2}{(2S_T + \beta_1)^2 + 4S_\omega^2} \left( \frac{(\beta_2 - 2S_T) \left( (2S_T + \beta_1)^2 + 4S_\omega^2 \right)}{(2S_T - \beta_2)^2 + 4S_\omega^2} \right) \right\} \\
 &= \frac{U^2}{1 - 4S_L^2} \left\{ \frac{\beta_1^2 - 2\beta_1 S_T}{2 \left( (2S_T - \beta_1)^2 + 4S_\omega^2 \right)} \right. \\
 &+ \frac{1}{2 \left( (2S_T + \beta_1)^2 + 4S_\omega^2 \right)} \left( -2\beta_1 S_T - \beta_1^2 + \frac{2\beta_1^2 (\beta_1^2 - 4S_T^2 + 4S_\omega^2)}{(\beta_1 - 2S_T)^2 + 4S_\omega^2} \right) \\
 &\quad + \frac{\beta_2^2 - 2\beta_2 S_T}{2 \left( (2S_T - \beta_2)^2 + 4S_\omega^2 \right)} \\
 &+ \frac{1}{2 \left( (2S_T + \beta_2)^2 + 4S_\omega^2 \right)} \left( -2\beta_2 S_T - \beta_2^2 + \frac{2\beta_2^2 (\beta_2^2 - 4S_T^2 + 4S_\omega^2)}{(\beta_2 - 2S_T)^2 + 4S_\omega^2} \right) \\
 &\quad + \frac{2S_L^2 (\beta_2 - 2S_T)}{(2S_T - \beta_2)^2 + 4S_\omega^2} + \frac{2S_L^2 (\beta_1 - 2S_T)}{(2S_T + \beta_1)^2 + 4S_\omega^2} \\
 &\quad \left. + \frac{2S_L^2 (\beta_1 - 2S_T)}{(2S_T - \beta_1)^2 + 4S_\omega^2} + \frac{2S_L^2 (\beta_2 - 2S_T)}{(2S_T + \beta_2)^2 + 4S_\omega^2} \right\}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{U^2}{1 - 4S_L^2} \left\{ \frac{\beta_1^2 - 2\beta_1 S_T}{2 \left( (2S_T - \beta_1)^2 + 4S_\omega^2 \right)} \right. \\
 &+ \frac{1}{2 \left( (2S_T + \beta_1)^2 + 4S_\omega^2 \right)} \left( -2\beta_1 S_T - \beta_1^2 + \frac{2\beta_1^2 (\beta_1^2 - 4S_T^2 + 4S_\omega^2)}{(\beta_1 - 2S_T)^2 + 4S_\omega^2} \right) \\
 &\quad + \frac{\beta_2^2 - 2\beta_2 S_T}{2 \left( (2S_T - \beta_2)^2 + 4S_\omega^2 \right)} \\
 &+ \frac{1}{2 \left( (2S_T + \beta_2)^2 + 4S_\omega^2 \right)} \left( -2\beta_2 S_T - \beta_2^2 + \frac{2\beta_2^2 (\beta_2^2 - 4S_T^2 + 4S_\omega^2)}{(\beta_2 - 2S_T)^2 + 4S_\omega^2} \right) \\
 &\quad \left. + \frac{4S_L^2 (\beta_1 - 2S_T)}{(2S_T - \beta_1)^2 + 4S_\omega^2} + \frac{4S_L^2 (\beta_2 - 2S_T)}{(2S_T - \beta_2)^2 + 4S_\omega^2} \right\}
 \end{aligned}$$

Finalmente utilizando las definiciones hechas anteriormente (3.53), (3.54) y (3.55) obtenemos que

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \rangle &= \frac{U^2}{1 - 4S_L^2} \sum_{i=1}^2 \left\{ \frac{\beta_i^2 - 2\beta_i S_T}{2\alpha_i^-} - \frac{\beta_i S_T}{\alpha_i^+} - \frac{\beta_i^2}{2\alpha_i^+} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{\beta_i^2 \gamma_i}{\alpha_i^+ \alpha_i^-} + \frac{4S_L^2 (\beta_i - 2S_T)}{\alpha_i^-} \right\} \tag{3.56}
 \end{aligned}$$

Las ecuaciones (3.52) y (3.56) se trazan luego en la Fig. 3.7 para el conjunto de parámetros  $\{S_L, S_T, S_\omega\} = \{0.0322, 0.0027, -0.0171\}$ , y una velocidad de autopropulsión  $U = 0.13$  m/s (tomado del promedio de las 100 realizaciones experimentales), que se considera que describen la dinámica de los hexbugs. Se puede ver en la Fig. 3.7 (a) que, para el MSD de los hexbugs, el experimento (círculos azules), la teoría dada por la Ec. (3.52) (líneas discontinuas verdes) y las simulaciones (línea discontinua naranja) coinciden completamente. El error experimental se muestra como un símbolo de error azul claro. Para la medición del MSS de los hexbugs que se muestra en la Fig. 3.7 (b), experimento (círculos azules), teoría dada por la Ec. (3.56) (líneas discontinuas verdes) y las simulaciones (línea discontinua naranja) tienen un acuerdo razonable.



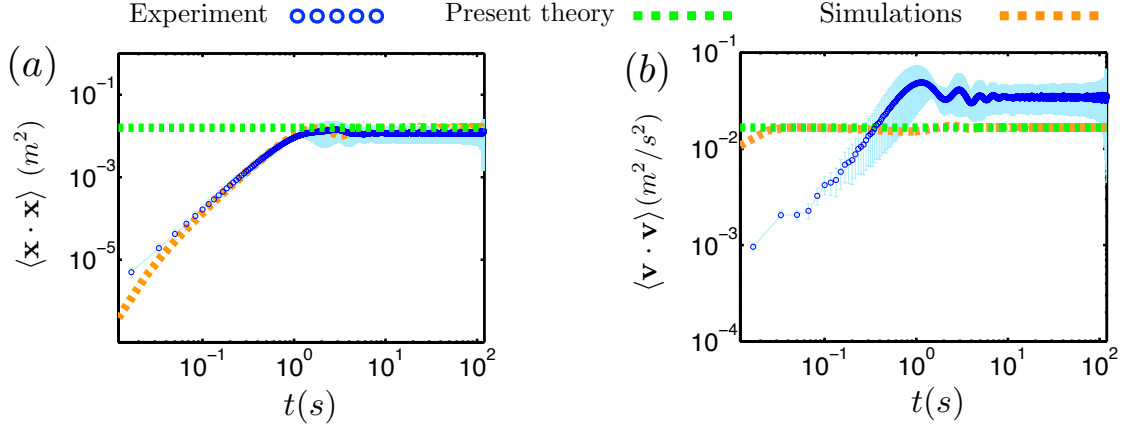


Figura 3.7: Desplazamiento cuadrático medio (MSD) y velocidad cuadrática media (MSS) para robots hexbugs en una antena parabólica con rugosidad adicional. (a) MSD de Hexbugs, experimento (círculos azules), teoría dada por la Ec. (3.52) (líneas discontinuas verdes) y las simulaciones (línea discontinua naranja) coinciden completamente. El error experimental se muestra como un símbolo de error azul claro. (b) Medición de MSS de Hexbugs, experimento (círculos azules), teoría dada por la Ec. (3.56) (líneas discontinuas verdes) y las simulaciones (línea discontinua naranja) tienen una buena concordancia. Esta teoría del tiempo y las simulaciones caen dentro del margen de error experimental en tiempos prolongados (símbolo de error azul claro).

Esta teoría del tiempo y las simulaciones caen dentro del margen de error experimental (símbolo de error azul claro) solo en tiempos prolongados. Para este caso, el error experimental es grande ya que el MSS acumula errores de las mediciones experimentales y del procedimiento numérico empleado para encontrar la velocidad en el sistema. Por tanto, la Fig. 3.7, indica que el modelo propuesto describe en buena medida el sistema actual, aunque podría estudiarse un modelo más preciso considerando la anisotropía en las partículas o incluso un modelo de fuerza de disipación diferente. Tenga en cuenta que el análisis numérico utilizado en esta sección consistió en un algoritmo de tipo Verlet de segundo orden [45] con un intervalo de tiempo de 0.0012 s y  $N = 2000$  realizaciones.

Note que la teoría y la simulación coinciden muy bien tanto en el MSD como el MSS (ver Fig. 3.7), esto una vez que pasa el tiempo suficiente para que las simulaciones lleguen a un valor estacionario. El valor experimental que no se ajusta satisfactoriamente con la teoría y la simulación es el MSS, esto se lo atribuimos al hecho de que nuestra propuesta aun es una primera aproximación ya que tomamos un coeficiente de fricción constante, sabiendo que el hexbug-nano tienen una forma no simétrica. Por lo que aún se puede plantear un modelo más preciso.

### 3.4. Funciones de distribución de probabilidad radial y de velocidad

Nuestro último objetivo es caracterizar experimental y numéricamente, las distribuciones de probabilidad radial y de velocidad de las partículas en estado estable,  $P(r)$  y  $P(v)$ , respectivamente. Usando los números de Stokes  $\{S_L, S_T, S_\omega\} = \{0.0322, 0.0027, -0.0171\}$  describiendo nuestro sistema, empleando 2000 realizaciones para simulaciones y 100 realizaciones para el experimento, mostramos las distribuciones estables numéricas y experimentales resultantes en la Fig. 3.8.

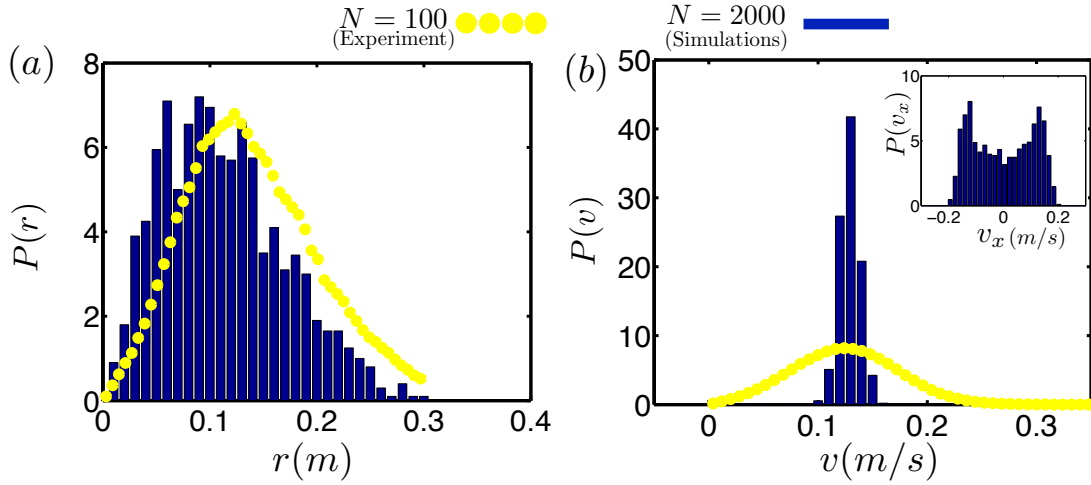


Figura 3.8: (a) Función de distribución de probabilidad radial estable numérica y experimental para  $N = 100$  realizaciones y  $N = 2000$  realizaciones, respectivamente. (b) Función de distribución de probabilidad de velocidad constante numérica y experimental para  $N = 100$  realizaciones y  $N = 2000$  realizaciones, respectivamente. Recuadro: función de distribución de probabilidad constante para la componente  $x$  del vector de velocidad.

La Fig. 3.8 (a) ilustra la distribución radial estable  $P(r)$ . De los números, ver barras azules, se observa un máximo alrededor de  $r = 0.1$  m. Del experimento, denotado como círculos amarillos en la Fig. 3.8 (a), observamos que la distribución radial tiene un máximo alrededor de  $r = 0.12$  m, que es un valor cercano al que se obtiene en las simulaciones, aunque no son tan parecidas, pero aun así se puede notar que toda la forma de distribución experimental es muy similar a la de las simulaciones. La Figura 3.8 (a) también muestra que los hexbugs en este sistema no se condensan en el borde de la antena. Esto ocurre porque en este sistema los hexbugs están sujetas a una trampa débil ( $0 < S_L < 1/2$ ) y a un torque intrínseco, lo que les da tiempo suficiente para reorientarse completamente antes de llegar al borde de la trampa, muestreando así más espacio.

La Fig. 3.8 (b) muestra la distribución de velocidad constante  $P(v)$  tanto numéri-

camente (barras azules) como experimentalmente (círculos amarillos). Esta vez sus máximos coinciden en  $v = 0.13$  m/s. También observamos que la PDF experimental tiene una desviación estándar mayor que la numérica. Esto se debe a que el experimento muestra el hecho de que los hexbugs tienen variaciones en su velocidad de propulsión. Esto se ilustra en la Fig. 3.9 donde la velocidad promedio del ensamble de los bugs,  $\bar{v} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^n v_i((j-1)\Delta t)/Nn$ , ( $N$  es el número de realizaciones,  $n$  es el número total de pasos discretos durante una simulación, y  $\Delta t$  es el paso de tiempo) varía entre  $v = 0.11$  m/s a  $v = 0.16$  m/s. Por tanto, pueden observarse experimentalmente velocidades de propulsión instantáneas superiores a 0.16 m/s. Por otro lado, nuestras simulaciones están configuradas para tener solo la velocidad de propulsión promedio de las 100 realizaciones, de ahí la razón de una desviación estándar más pequeña.

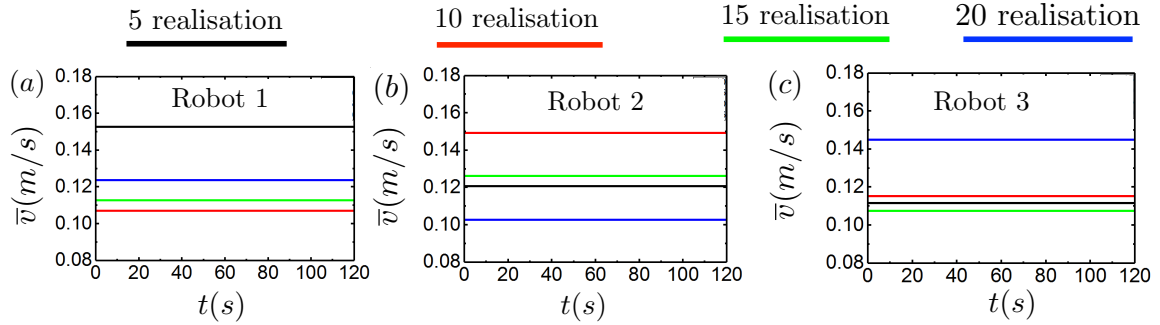


Figura 3.9: Ensamble de velocidad promedio,  $\bar{v}$ , para tres hexbugs, y el efecto del número de realizaciones en él.

Finalmente, el recuadro de la Fig. 3.8 (b) muestra la función de distribución de probabilidad de la componente  $x$  del vector velocidad,  $v_x$ . Por simetría, el otro componente es el mismo. Este recuadro indica claramente que el sistema actual no sigue una función de distribución de velocidad de Maxwell-Boltzmann, que es el resultado de la naturaleza de no equilibrio del sistema actual. De hecho, sigue una distribución simétrica de dos picos, y sus máximos ocurren alrededor de la velocidad de propulsión de los hexbugs. La distribución de picos dobles también se ha informado recientemente en [4, 46]. En particular en la primera referencia [4] proponen un modelo que generaliza el nuestro, en el cual se toma en cuenta la contribución de la inercia rotacional, es decir, no desprecian el momento de inercia. Se pueden encontrar modelos alternativos de partículas activas que describen una distribución de velocidad constante en [47].



# Capítulo 4

## Materia activa inercial con propulsión periódica

### 4.1. Introducción

El avance en el estudio de la materia activa ha brindado información relevante sobre fenómenos que ocurren en sistemas biológicos y artificiales fuera de equilibrio, como son las transiciones de fase y el autoensamblaje de partículas [48, 49, 50, 51, 52]. Adicionalmente las posibles aplicaciones que conlleva su estudio han hecho que esta área de investigación siga en aumento. Una revisión reciente, acerca de los avances que se han tenido en este campo de estudio y los retos que se tienen por delante, fue hecho por Gerhard Gompper y sus colegas [16]. La mayor parte de los trabajos sobre materia activa se centran en sistemas a escala micrométrica con número de Reynolds muy bajo, en estas condiciones el sistema se encuentra en el régimen sobreamortiguado, una de las descripciones más aceptadas para este caso es el que proporciona el movimiento browniano activo [19, 43, 53]. El modelo browniano activo considera a las fluctuaciones térmicas del medio como ruidos blancos gaussianos, dota a las partículas con una fuerza de autopropulsión efectiva y desprecia los efectos inerciales.

Recientemente se han hecho desarrollos en donde se consideran partículas autopropulsadas más grandes con número de Reynolds no bajos, en estas condiciones los efectos inerciales se vuelven relevantes en la dinámica. En estos casos se dice que se está en el régimen subamortiguado en el cual la dinámica de los corredores (partículas) está descrita por el movimiento Langevin activo que a diferencia del movimiento browniano activo no desprecia la inercia de los corredores. Algunos ejemplos de este tipo de sistemas son los granulares autopropulsados sobre una placa vibratoria [54, 28, 30, 41, 55, 32, 56, 57, 58, 59] y los minirobots autopropulsados [60, 61]. Recientemente H. Löwen hizo una revisión acerca del movimiento browniano activo y después amplió el modelo hacia el movimiento de Langevin activo [62]. Cuando se habla de considerar la inercia se presentan dos casos, en el primer caso solo se toma en consideración la inercia traslacional, es decir la masa de las partículas, a este tipo de sistemas los nombramos como materia activa semi-inercial, hay varios trabajos que abordan este tipo de sistemas [63, 39, 64, 3, 65], de hecho, el sistema abordado en el

Capítulo 3 de esta tesis entra en esta categoría, es decir, el modelo propuesto para describir los robots hexbugs-nano en una antena parabólica con rugosidad añadida es un sistema semi-inercial. El segundo caso es cuando se toman en consideración la inercia traslacional y rotacional, es decir la masa y el momento de inercia de los corredores, a este tipo de sistemas los nombramos como materia activa completamente inercial. Estos últimos sistemas son los que se han empezado a estudiar más recientemente, algunos de estos trabajos se han centrado en discutir los efectos inerciales utilizando experimentos [4], otros han discutido dichos efectos sobre la difusión y las presiones de nado y Reynolds en sistemas de materia activa completamente inerciales [34] y también se ha abordado el estudio de los efectos inerciales en materia activa atrapada [35].

En cuanto a la propulsión de partículas activas normalmente como primera aproximación se supone constante, pero muchas veces esta suposición no es suficiente para modelar algún sistema de interés, por lo que han surgido trabajos en los que se estudian sistemas con propulsión variable tanto para el caso de nadadores reales y artificiales. En el caso de nadadores reales hay varios trabajos que reportan variaciones en la propulsión [66, 67, 68, 69, 70, 71, 72, 73], más recientemente Otte y col. [74] mostró que las bacterias *Salmonella Typhimurium* pueden describirse como partículas activas quirales con fuertes fluctuaciones de velocidad activa, que son de origen biológico, en lugar de térmico. Un trabajo teórico pionero de este tipo en el contexto de la materia activa es el de Peruani y col. [75] que muestra como una evolución temporal en la propulsión afecta el transitorio de las propiedades de transporte de una partícula activa, así como el coeficiente de difusión de esta. Otro trabajo teórico que cabe mencionar es el hecho por Großmann y col. [76], en ese trabajo estudia las propiedades de difusión de las partículas autopropulsadas que se mueven a velocidad constante e invierten repetidamente su dirección de movimiento, sus resultados lo llevaron a sugerir experimentos adicionales en ese contexto. Para el caso de nadadores artificiales, se ha visto que se puede cambiar la motilidad de partículas Janus en mezclas binarias casi críticas [77] o críticas [78] por medio del tamaño y la forma de las gotas nucleadas alrededor de la partícula. También se ha reportado que utilizando ondas de ultrasonido viajeras la propulsión depende de la forma de las nanopartículas y micropartículas [79] y que en una mezcla binaria de nano / micro nadadores activos puede darse una mejora en la motilidad mediante la transferencia de motilidad [80], estos últimos trabajos son recientes. Lo anterior nos hace ver que la propulsión de partículas activas reales depende de varios factores y que varían en el tiempo, por lo tanto, asumir que la propulsión de las partículas es constante aún está lejos de la realidad, más aún si hablamos de materia activa macroscópica.

En este trabajo proponemos una dependencia temporal explícita de la velocidad de propulsión de partículas estocásticas activas inerciales (con masa y momento de inercia) que no interactúan. La velocidad de propulsión la suponemos como una función periódica, que en el caso más general se expresa como una serie de Fourier. Se plantean las ecuaciones de movimiento para este sistema siguiendo un formalismo de Langevin, resolvemos estas ecuaciones de forma analítica y encontramos su tensor de desplazamiento cuadrático medio. Se analizan tres casos particulares, el primer

caso es cuando la velocidad de propulsión es una función sinusoidal, la segunda cuando es tipo onda cuadrada y el tercer caso es cuando es una función tipo zigzag. Algunos trabajos previos similares a este fueron hechos por S. Babel [81] y E. Lauga [82], pero los sistemas que abordaron se encontraban en el caso sobreamortiguado. El presente trabajo generaliza la investigación de S. Babel, E. Lauga y los demás trabajos sobre materia activa inercial, además de que el modelo presentado es una mejor aproximación a la realidad, por lo que nuestros resultados podrían arrojar luz sobre el movimiento de la materia activa presente en la naturaleza.

## 4.2. Modelo teórico

En esta sección se describe el modelo que proponemos, el cual tiene algunas consideraciones que no se han hecho en los trabajos publicados hasta este momento. Recordemos que en el capítulo 3 se propuso un modelo para los hexbugs el cual es más simple a lo que queremos tratar en este capítulo, ya que se despreció la inercia rotacional, no se consideró ruido traslacional y se propuso una velocidad de propulsión constante. La intención en este capítulo es generalizar ese modelo al igual que otras propuestas que se han hecho sobre partículas activas estocásticas con inercia que no interactúan.

Nosotros proponemos un modelo en el cual las partículas activas poseen inercia no despreciable y una velocidad que depende del tiempo de forma periódica  $U(t)$ , esto es importante ya que la mayoría de los organismos unicelulares no ejecutan un movimiento continuo y mucho menos lo hacen organismos más complejos, así que suponer que las partículas activas poseen una velocidad que varíe con el tiempo es una mejor aproximación a la realidad.

El modelo que proponemos consta en un sistema en dos dimensiones (2D) donde las partículas activas son de tamaño micrométrico e incluso pueden ser milimétricas, y están sometidas a fuerzas y torcas estocásticas. Las partículas tienen forma de disco cuya densidad es uniforme, tienen un radio  $a$  y su orientación está dada por el ángulo de rotación  $\theta(t)$ , además se considera tanto la masa  $M$  como el momento de inercia  $I$  de las mismas.

En la Fig. 4.1 se muestra un esquema del modelo descrito, en el cual se pueden observar dos marcos de referencia, uno es el marco de laboratorio y el otro está centrado en el origen del disco, y también se puede ver representado un camino aleatorio que va siguiendo la trayectoria de la partícula. Cabe mencionar que el modelo que se propone puede servir incluso para describir fenómenos macroscópicos, es decir, materia activa a escalas milimétricas, siempre y cuando el sistema a estudiar satisfaga las condiciones del modelo propuesto.

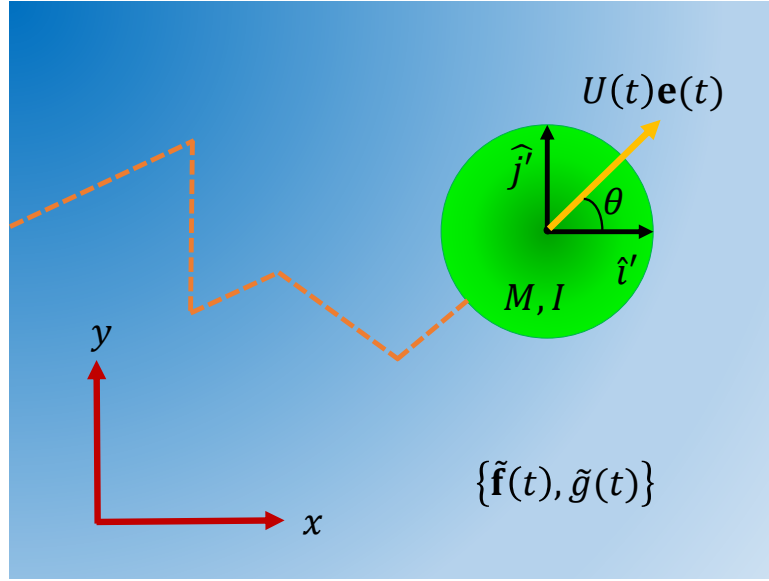


Figura 4.1: Esquema del modelo propuesto. La partícula estocástica activa inercial (círculo verde) de masa  $M$  e inercia rotacional  $I$ , está sujeta a fuerzas y torcas estocásticas ( $\tilde{\mathbf{f}}$  y  $\tilde{g}$ ). Su vector de propulsión ( $U(t)\mathbf{e}(t)$ ) con dirección aleatoria  $\theta$  se indica como una flecha amarilla.

#### 4.2.1. Ecuación traslacional

Planteando la segunda ley de Newton para la parte traslacional de este sistema se obtiene la ecuación de Langevin para una partícula activa inercial con movimiento aleatorio que se encuentra en un medio que ejerce fuerzas y torcas estocásticas sobre él, esta ecuación esta en términos de la velocidad por ello se agrega otra ecuación la cual relaciona la posición de la partícula con su velocidad, estas dos ecuaciones son las siguientes

$$M \frac{d\mathbf{v}(t)}{dt} = -R_U \mathbf{v} + \mathbf{F}_s(t) + \tilde{\mathbf{f}}(t) \quad (4.1)$$

$$\mathbf{v}(t) = \frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} \quad (4.2)$$

donde  $R_U$  es el factor de arrastre traslacional,  $\mathbf{F}_s = R_U U(t)\mathbf{e}(t)$  es la fuerza autopropulsiva de la partícula,  $\mathbf{e}(t) = (\cos \theta(t), \sin \theta(t))$  es el vector orientación definido por su dirección de avance,  $U(t)$  es la velocidad de propulsión de la partícula que en este caso depende del tiempo y  $\tilde{\mathbf{f}}(t)$  es la fuerza estocástica debida al medio en el que se encuentran las partículas el cual cumple con las propiedades de ruido blanco, es decir,

$$\langle \tilde{\mathbf{f}}(t) \rangle = 0 \quad (4.3)$$



$$\langle \tilde{f}_i(t_1) \tilde{f}_j(t_2) \rangle = 2D_T R_U^2 \delta_{ij} \delta(t_1 - t_2) \quad (4.4)$$

$$\langle \tilde{f}_i(t_1) e_j(t_2) \rangle = 0 \quad (4.5)$$

donde  $D_T$  es el coeficiente de difusión traslacional. Lo único que falta para que nuestro modelo quede completamente descrito es especificar el tipo de función que toma la velocidad con la que se auto-propulsa la partícula ya que solo hemos mencionado que es periódica, esto es lo que se trata a continuación.

Proponemos que la velocidad de propulsión  $U(t)$  sea una función periódica y como sabemos hay distintos tipos de funciones periódicas que se pueden modelar dependiendo de que se desee estudiar, algunos ejemplos de funciones periódicas son las funciones seno, coseno, zigzag, onda cuadrada entre otras, a continuación se muestran algunas de estas funciones en la siguiente figura.

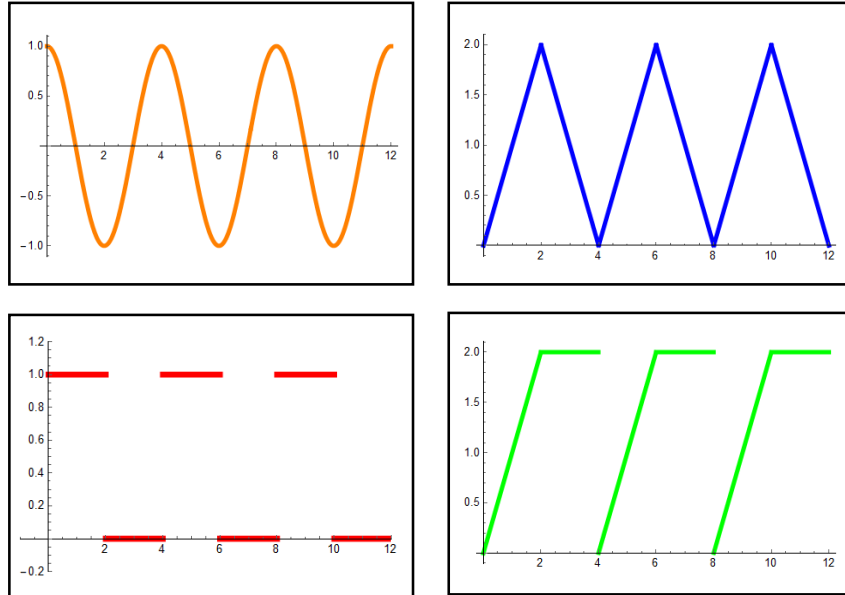


Figura 4.2: Estos son algunos ejemplos de funciones periódicas.

Para abordar de manera general el caso en el que la velocidad de propulsión es una función periódica se propone una velocidad del siguiente tipo

$$U(t) = U_0 \xi(t) \quad (4.6)$$

donde  $\xi(t)$  es una función periódica cualquiera de periodo  $T$ . Esta función se puede aproximar por una serie de Fourier como se muestra a continuación

$$\xi(t) = \frac{\alpha_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (\alpha_n \cos(n\omega t) + b_n \sin(n\omega t))$$

donde  $\omega = \frac{2\pi}{T}$  y los términos  $\alpha_0$ ,  $\alpha_n$  y  $b_n$  son los coeficientes de Fourier que se pueden determinar mediante las siguientes integrales.

$$\alpha_0 = \frac{2}{T} \int_0^T \xi(t) dt \quad (4.7)$$

$$\alpha_n = \frac{2}{T} \int_0^T \xi(t) \cos(n\omega t) dt \quad \text{para } n > 0 \quad (4.8)$$

$$b_n = \frac{2}{T} \int_0^T \xi(t) \sin(n\omega t) dt \quad \text{para } n > 0 \quad (4.9)$$

Se puede notar que la función está definida en términos de sumas infinitas, esto quiere decir que es posible representar cualquier función periódica de forma exacta si se conocen todos sus coeficientes de Fourier que en principio son infinitos, en la práctica no es posible conocer todos estos términos. Como sabemos solo podemos conocer un número finito de los coeficientes de Fourier por lo que hacemos la siguiente definición; Para la serie de Fourier de una función periódica  $\xi(t)$  con periodo temporal  $T$  la  $N$ -ésima suma parcial está dada por:

$$\xi_N(t) = \frac{\alpha_0}{2} + \sum_{n=1}^N (\alpha_n \cos(n\omega t) + b_n \sin(n\omega t)) \quad (4.10)$$

Esta función es la que manejaremos en este trabajo ya que es la que tiene más sentido utilizar, dependiendo de qué tan preciso se desee la función a representar será el número de coeficientes que se utilicen, en el caso más ideal  $N = \infty$  que conllevaría obtener  $\xi_\infty(t)$ .

Entonces la velocidad de propulsión periódica que proponemos es la siguiente

$$U(t) = U_0 \xi_N(t) = U_0 \left[ \frac{\alpha_0}{2} + \sum_{n=1}^N (\alpha_n \cos(n\omega t) + b_n \sin(n\omega t)) \right] \quad (4.11)$$

Como ya se mostró anteriormente la fuerza de propulsión se define de la siguiente forma  $\mathbf{F}_s = R_U U(t) \mathbf{e}(t)$  por lo que su expresión sustituyendo  $U(t)$  será la siguiente

$$\mathbf{F}_s^{(N)} = R_U U_0 \mathbf{e}(t) \left[ \frac{\alpha_0}{2} + \sum_{n=1}^N (\alpha_n \cos(n\omega t) + b_n \sin(n\omega t)) \right] \quad (4.12)$$

### 4.2.2. Ecuación rotacional

Ahora vamos a plantear la ecuación de movimiento rotacional correspondiente a nuestro sistema, pero antes recordemos una relación importante que se mencionó en el Capítulo 3 en la sección de ecuación rotacional, que relaciona los marcos de referencia de laboratorio y el montado en la partícula, y que además es necesaria

para obtener las correlaciones entre los vectores directores, la relación a la que nos referimos es la siguiente

$$\frac{d\mathbf{e}}{dt} = \Omega \times \mathbf{e} \quad (4.13)$$

con

$$\Omega(t) = \frac{d\theta(t)}{dt} \quad (4.14)$$

En donde  $\Omega(t)$  es la velocidad angular y  $\mathbf{e} = (e_1, e_2) = (\cos \theta(t), \sin \theta(t))$  es el vector de orientación, el cual es unitario. Esta relación surge de considerar un marco de referencia con origen en el centro del disco.

La ecuación de movimiento a la que está sujeta el vector de orientación  $\mathbf{e}$  es (4.13) la cual no se desarrolla explícitamente debido a que solo nos vuelve a llevar a la misma expresión como se mostró en el Capítulo 3.

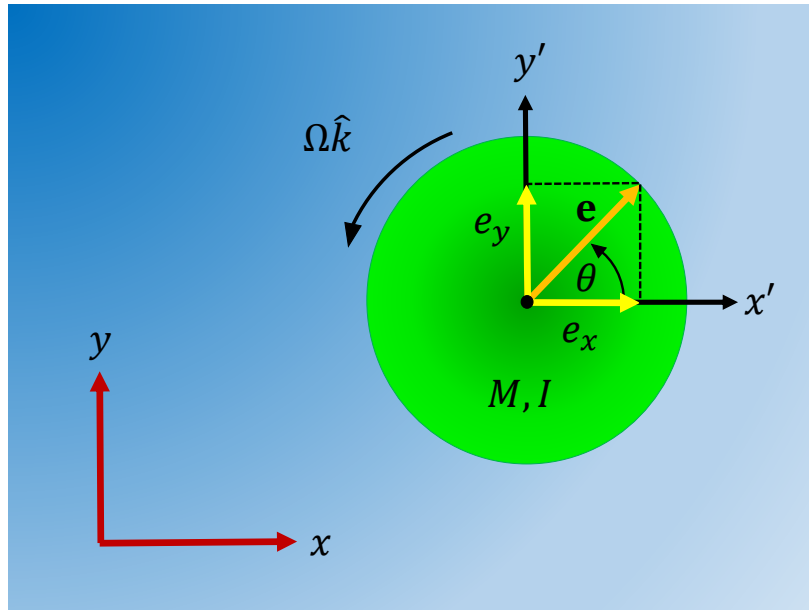


Figura 4.3: Esquema del movimiento rotacional del disco.

A continuación planteamos la segunda ley de Newton para rotaciones, que en general se expresa como

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \mathbf{N} \quad (4.15)$$

donde  $\mathbf{N}$  es la suma de todas las torcas y  $\mathbf{L} = I\Omega(t)$  es el momento angular, en nuestro caso las torcas que actúan sobre la partícula son  $\mathbf{N} = -R_\Omega\Omega + \tilde{g}(t)$ , por lo tanto, la ecuación de Langevin para la parte rotacional está dada por

$$I \frac{d\Omega(t)}{dt} = -R_\Omega \Omega + \tilde{g}(t) \quad (4.16)$$

con  $I = \frac{1}{2}Ma^2$  que es el momento de inercia de un disco de radio  $a$ ,  $R_\Omega$  es el factor de arrastre rotacional y  $\tilde{g}(t)$  es la torca estocástica debido al medio en el que se encuentra la partícula y cumple con las propiedades de ruido blanco, es decir,

$$\langle \tilde{g}(t) \rangle = 0 \quad (4.17)$$

$$\langle \tilde{g}(t_1)\tilde{g}(t_2) \rangle = 2D_\Omega R_\Omega^2 \delta(t_1 - t_2) \quad (4.18)$$

$$\langle \tilde{g}(t_1)e_i(t_2) \rangle = 0 \quad (4.19)$$

donde  $D_\Omega$  es el coeficiente de difusión rotacional del disco. Con esto queda completamente definido nuestro modelo.

### 4.3. Solución a las ecuaciones de movimiento

El primer paso para poder calcular el MSD es resolver las ecuaciones de movimiento, para ello se tratan como ecuaciones diferenciales lineales de primer orden comenzando con (4.1) y (4.16), para empezar las reescribimos de una forma conveniente tal como se muestra a continuación

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} + \frac{R_U}{M}\mathbf{v} = \frac{1}{M} \left( \mathbf{F}_s(t) + \tilde{\mathbf{f}}(t) \right) \quad (4.20)$$

$$\frac{d\Omega}{dt} + \frac{R_\Omega}{I}\Omega = \frac{\tilde{g}(t)}{I} \quad (4.21)$$

La función de peso que le corresponde a cada ecuación es  $e^{\frac{R_U}{M}t}$  y  $e^{\frac{R_\Omega}{I}t}$  respectivamente, por lo que las ecuaciones quedan como

$$\frac{d}{dt} \left( e^{\frac{R_U}{M}t} \mathbf{v} \right) = \frac{e^{\frac{R_U}{M}t}}{M} \left( \mathbf{F}_s(t) + \tilde{\mathbf{f}}(t) \right) \quad (4.22)$$

$$\frac{d}{dt} \left( e^{\frac{R_\Omega}{I}t} \Omega \right) = e^{\frac{R_\Omega}{I}t} \frac{\tilde{g}(t)}{I} \quad (4.23)$$

se integran las ecuaciones anteriores

$$\int_0^t d \left( e^{\frac{R_U}{M}t} \mathbf{v} \right) = \frac{1}{M} \int_0^t e^{\frac{R_U}{M}t_1} \left( \mathbf{F}_s(t_1) + \tilde{\mathbf{f}}(t_1) \right) dt_1 \quad (4.24)$$

$$\int_0^t d \left( e^{\frac{R_\Omega}{I}t} \Omega \right) = \frac{1}{I} \int_0^t e^{\frac{R_\Omega}{I}t_1} \tilde{g}(t_1) dt_1 \quad (4.25)$$

las solución para cada una son

$$\mathbf{v}(t) = \mathbf{v}_0 e^{-\frac{t}{\tau_M}} + \frac{1}{M} \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \left( \mathbf{F}_s(t_1) + \tilde{\mathbf{f}}(t_1) \right) dt_1 \quad (4.26)$$

$$\Omega(t) = \Omega_0 e^{-\frac{t}{\tau_I}} + \frac{1}{I} \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_I}(t-t_1)} \tilde{g}(t_1) dt_1 \quad (4.27)$$

donde los tiempos de relajación traslacional y rotacional se han definido como  $\tau_M \equiv \frac{M}{R_U}$  y  $\tau_I \equiv \frac{I}{R_\Omega}$ . Utilizando los resultados obtenidos se pueden calcular la posición y el ángulo de orientación, de (4.2) y (4.14) se tiene que

$$d\mathbf{x} = \mathbf{v} dt \quad (4.28)$$

$$d\theta = \Omega dt \quad (4.29)$$

Sustituyendo los valores obtenidos de  $\mathbf{v}$  y  $\Omega$ , y colocando los signos de integración estas ecuaciones quedan de la siguiente manera

$$\int_0^t d\mathbf{x} = \mathbf{v}_0 \int_0^t e^{-\frac{t_0}{\tau_M}} dt_0 + \frac{1}{M} \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t_0-t_1)} \left( \mathbf{F}_s(t_1) + \tilde{\mathbf{f}}(t_1) \right) dt_0 dt_1 \quad (4.30)$$

$$\int_0^t d\theta = \Omega_0 \int_0^t e^{-\frac{t_0}{\tau_I}} dt_0 + \frac{1}{I} \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_I}(t_0-t_1)} \tilde{g}(t_1) dt_0 dt_1 \quad (4.31)$$

este tipo de integrales ya están resueltas en la literatura (Coffey [8]), las soluciones que les corresponden son las que se muestran a continuación

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}_0 + \tau_M \mathbf{v}_0 \left( 1 - e^{-\frac{t}{\tau_M}} \right) + \frac{1}{R_U} \int_0^t \left( 1 - e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \right) \left[ \mathbf{F}_s(t_1) + \tilde{\mathbf{f}}(t_1) \right] dt_1 \quad (4.32)$$

$$\theta(t) = \theta_0 + \tau_I \Omega_0 \left( 1 - e^{-\frac{t}{\tau_I}} \right) + \frac{1}{R_\Omega} \int_0^t \left( 1 - e^{-\frac{1}{\tau_I}(t-t_1)} \right) \tilde{g}(t_1) dt_1 \quad (4.33)$$

estas son la posición y el ángulo de rotación para una partícula activa con inercia de forma general. Para poder calcular el MSD primero hay que aplicar las condiciones iniciales  $\mathbf{x}(t=0) = 0$  y  $\mathbf{v}(t=0) = 0$  para simplificar los cálculos. Aplicando la primera condición en (4.32) se tiene que

$$0 = \mathbf{x}_0 + \tau_M \mathbf{v}_0 \quad (4.34)$$

$$\mathbf{v}_0 = -\frac{\mathbf{x}_0}{\tau_M} \quad (4.35)$$

usando la segunda condición en (4.26) se llega a que  $\mathbf{v}_0 = 0$  y  $\mathbf{x}_0 = 0$ , por lo que las expresiones para la posición y la velocidad se reducen a

$$\mathbf{x}(t) = \frac{1}{R_U} \int_0^t \left(1 - e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)}\right) \left[\mathbf{F}_s(t_1) + \tilde{\mathbf{f}}(t_1)\right] dt_1 \quad (4.36)$$

$$\mathbf{v}(t) = \frac{1}{M} \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \left(\mathbf{F}_s(t_1) + \tilde{\mathbf{f}}(t_1)\right) dt_1 \quad (4.37)$$

Estas últimas expresiones son las que dictan el movimiento de la partícula, la cual traza una trayectoria estocástica. Si bien ya tenemos las expresiones para describir el movimiento no son de gran utilidad por el simple hecho de que su trayectoria es aleatoria y no se puede predecir. Es por eso que el dato que nos interesa es el MSD.

#### 4.4. Desplazamiento cuadrático medio

Antes de tratar el caso general en donde la velocidad de propulsión es cualquier función periódica representada por una serie de Fourier (4.11), primero calculamos el MSD para una velocidad de propulsión sinusoidal con el objetivo de poder comparar este resultado con el caso más general.

La velocidad sinusoidal se modela con la siguiente función  $U(t) = U_T \cos(\alpha t) + U_0$ , como se puede ver esta función tiene tres constantes  $U_T$ ,  $U_0$  y  $\alpha$  cuyos valores dependen del caso particular que se desee estudiar, nosotros lo manejaremos como incógnitas para resolver el caso más general. En la figura se puede observar la gráfica de la velocidad contra el tiempo para un cierto caso particular solamente para ver su comportamiento.

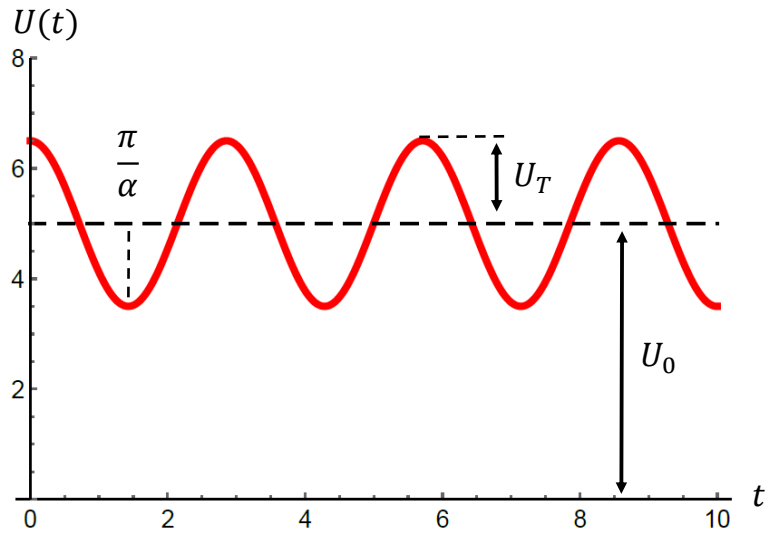


Figura 4.4: Gráfica de velocidad de propulsión sinusoidal contra el tiempo, donde  $U_T$ ,  $U_0$  y  $\alpha$  son parámetros que dependen del caso particular que se desee estudiar.

Para calcular el MSD primero se desarrolla la expresión de la posición (4.36)

$$\mathbf{x}(t) = \frac{1}{R_U} \left[ \int_0^t \mathbf{F}_s(t_1) dt_1 + \int_0^t \tilde{\mathbf{f}}(t_1) dt_1 - \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \mathbf{F}_s(t_1) dt_1 - \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \tilde{\mathbf{f}}(t_1) dt_1 \right]$$

lo siguiente es sustituir el valor de la fuerza  $\mathbf{F}_s = R_U [U_T \cos(\alpha t) + U_0] \mathbf{e}(t)$  quedando lo siguiente

$$\begin{aligned} \mathbf{x}(t) = & \frac{1}{R_U} \left[ R_U U_T \int_0^t \cos(\alpha t_1) \mathbf{e}(t_1) dt_1 + R_U U_0 \int_0^t \mathbf{e}(t_1) dt_1 \right. \\ & + \int_0^t \tilde{\mathbf{f}}(t_1) dt_1 - R_U U_T \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \cos(\alpha t_1) \mathbf{e}(t_1) dt_1 \\ & \left. - R_U U_0 \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \mathbf{e}(t_1) dt_1 - \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \tilde{\mathbf{f}}(t_1) dt_1 \right] \end{aligned} \quad (4.38)$$

antes de seguir con el cálculo del MSD hagamos la siguiente consideración, este sistema se supone simétrico y sin torcas externas que lo afecten, esto quiere decir que las componentes del tensor MSD fuera de la diagonal son cero, lo anterior se puede expresar matemáticamente como

$$\langle x_a(t_1) x_b(t_2) \rangle = 0$$

$$\langle x_a(t_1) x_a(t_2) \rangle \neq 0$$

solo quedan dos componentes del MSD y como son simétricos basta con calcular una ya que la otra tendrá la misma solución, ya sea  $\langle x_1(t_1) x_1(t_2) \rangle$  ó  $\langle x_2(t_1) x_2(t_2) \rangle$ , como la posición está dada por 6 integrales al multiplicarlo por otra posición se obtienen 36 dobles integrales pero varias se anulan al hacer el promedio debido a una de las propiedades de la fuerza estocástica la cual es  $\langle \tilde{f}_i(t_1) x_j(t_2) \rangle = 0$ , y utilizando la identidad trigonométrica  $\cos(x) \cos(y) = \frac{1}{2} [\cos(x+y) + \cos(x-y)]$  la expresión para una de las componentes del MSD queda

$$\begin{aligned} \langle x_1(t) \cdot x_1(t) \rangle = & \frac{1}{R_U^2} \left[ \frac{R_U^2 U_T^2}{2} \int_0^t \int_0^t \cos(\alpha [t_1 + t_2]) \langle e_1(t_1) e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \right. \\ & + \frac{R_U^2 U_T^2}{2} \int_0^t \int_0^t \cos(\alpha [t_1 - t_2]) \langle e_1(t_1) e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \\ & \left. + R_U^2 U_T U_0 \int_0^t \int_0^t \cos(\alpha t_1) \langle e_1(t_1) e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{R_U^2 U_T^2}{2} \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_2)} \cos(\alpha[t_1+t_2]) \langle e_1(t_1)e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \\
& -\frac{R_U^2 U_T^2}{2} \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_2)} \cos(\alpha[t_1-t_2]) \langle e_1(t_1)e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \\
& -R_U^2 U_T U_0 \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_2)} \cos(\alpha t_1) \langle e_1(t_1)e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \\
& +R_U^2 U_T U_0 \int_0^t \int_0^t \cos(\alpha t_2) \langle e_1(t_1)e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \\
& +R_U^2 U_0^2 \int_0^t \int_0^t \langle e_1(t_1)e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \\
& -R_U^2 U_T U_0 \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_2)} \cos(\alpha t_2) \langle e_1(t_1)e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \\
& -R_U^2 U_0^2 \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_2)} \langle e_1(t_1)e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \\
& + \int_0^t \int_0^t \langle \tilde{f}_1(t_1)\tilde{f}_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 - \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_2)} \langle \tilde{f}_1(t_1)\tilde{f}_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \\
& -\frac{R_U^2 U_T^2}{2} \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \cos(\alpha[t_1+t_2]) \langle e_1(t_1)e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \\
& -\frac{R_U^2 U_T^2}{2} \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \cos(\alpha[t_1-t_2]) \langle e_1(t_1)e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \\
& -R_U^2 U_T U_0 \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \cos(\alpha t_1) \langle e_1(t_1)e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \\
& +\frac{R_U^2 U_T^2}{2} \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(2t-t_1-t_2)} \cos(\alpha[t_1+t_2]) \langle e_1(t_1)e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \\
& +\frac{R_U^2 U_T^2}{2} \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(2t-t_1-t_2)} \cos(\alpha[t_1-t_2]) \langle e_1(t_1)e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \\
& +R_U^2 U_T U_0 \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(2t-t_1-t_2)} \cos(\alpha t_1) \langle e_1(t_1)e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \\
& -R_U^2 U_T U_0 \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \cos(\alpha t_2) \langle e_1(t_1)e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1
\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
& -R_U^2 U_0^2 \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \langle e_1(t_1) e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \\
& + R_U^2 U_T U_0 \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(2t-t_1-t_2)} \cos(\alpha t_2) \langle e_1(t_1) e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \\
& + R_U^2 U_0^2 \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(2t-t_1-t_2)} \langle e_1(t_1) e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \\
& - \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \langle \tilde{f}_1(t_1) \tilde{f}_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \\
& + \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(2t-t_1-t_2)} \langle \tilde{f}_1(t_1) \tilde{f}_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \Big]
\end{aligned}$$

Algunas de las integrales anteriores son conocidas ya que las integrales con una correlación de fuerzas estocásticas  $\langle \tilde{f}_1(t_1) \tilde{f}_1(t_2) \rangle$  ya ha sido reportado en trabajos anteriores y el tipo de integrales que han sido abordadas más recientemente son las que tienen entre sus términos la correlación entre los vectores de orientación, que para el caso de materia activa completamente inercial está dada por

$$\langle \mathbf{e}(t) \cdot \mathbf{e}(t_1) \rangle = e^{-S_R \left[ \frac{1}{\tau_I}(t-t_1) - 1 + e^{-\frac{1}{\tau_I}(t-t_1)} \right]} \quad (4.39)$$

Lo anterior se ha reportado en trabajos similares [34, 35], en los cuales se han definido tiempos de relajación que para el sistema que estamos trabajando también son válidos, estos tiempos de relajación son:  $\tau_R = 1/D_\Omega$ ,  $\tau_M = M/R_U$  y  $\tau_I = I/R_\Omega$ . Usando estas escalas de tiempo, se construyen los siguientes números de Stokes adimensionales:  $S_R = \tau_I/\tau_R$  y  $S_T = \tau_M/\tau_R$ .

Resolver integrales que en el integrando tienen estas correlaciones que además pueden estar multiplicados por una exponencial y una función sinusoidal, como se observa en la expresión para  $\langle x_1^2 \rangle$ , es una tarea laboriosa ya que hay que realizar muchos pasos algebraicos y cambios de variable, ya que el objetivo de este escrito no es abundar en los cálculos matemáticos, si no en extraer información sobre la dinámica de este sistema, no se muestra la resolución para cada una de las integrales, pero si es importante mostrar la forma en que se resuelven. Por ello se toma una de las integrales mencionadas para explicar su resolución, esta integral es la siguiente

$$\psi_7 = \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \langle e_1(t_1) e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \quad (4.40)$$

La resolución a este tipo de integrales se presenta en el Apéndice, para resolver las otras integrales con correlación entre los vectores de orientación se procede de forma similar. Al calcular las integrales y hacer el límite para tiempos grandes ( $t \rightarrow \infty$ ) para cada una de ellas de forma separada se obtiene expresiones cortas, pero hay que sumarlas todas y como se puede intuir el resultado completo es muy extenso, para reducir el tamaño de la expresión se hicieron las siguientes definiciones

$$A_1 = \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R-1} \Gamma(S_R, 0, S_R) \quad (4.41)$$

$$A_2 = \left( \frac{1}{S_R} \right)^{\frac{S_R}{S_T} + S_R - 1} \Gamma\left(\frac{S_R}{S_T} + S_R, 0, S_R\right) \quad (4.42)$$

$$A_3 = \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R + i\alpha\tau_I - 1} \Gamma(S_R + i\alpha\tau_I, 0, S_R) \quad (4.43)$$

$$A_4 = \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R - i\alpha\tau_I - 1} \Gamma(S_R - i\alpha\tau_I, 0, S_R) \quad (4.44)$$

$$A_5 = \left( \frac{1}{S_R} \right)^{\frac{S_R}{S_T} + S_R + i\alpha\tau_I - 1} \Gamma\left(\frac{S_R}{S_T} + S_R + i\alpha\tau_I, 0, S_R\right) \quad (4.45)$$

$$A_6 = \left( \frac{1}{S_R} \right)^{\frac{S_R}{S_T} + S_R - i\alpha\tau_I - 1} \Gamma\left(\frac{S_R}{S_T} + S_R - i\alpha\tau_I, 0, S_R\right) \quad (4.46)$$

que cuenta entre sus términos con la función gamma incompleta generalizada que se define de la siguiente forma

$$\Gamma(a, b, c) = \int_b^c q^{a-1} e^{-q} dq \quad (4.47)$$

Por lo tanto

$$\begin{aligned} \langle x_1^2(t) \rangle &\cong \frac{1}{R_U^2} \left\{ \frac{R_U^2 U_T^2 e^{S_R \tau_I}}{4S_R} \left( \Re \left[ \frac{e^{i2\alpha t}}{i\alpha} A_3 - \frac{1}{i\alpha} A_4 \right] + \Re [A_4 + A_3] t \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \Re \left[ \frac{e^{i2\alpha t}}{\alpha_{III}} A_5 + \frac{e^{i2\alpha t}}{\alpha_{III}} A_3 \right] - \tau_M \Re [A_6 + A_4] \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \Re \left[ \frac{e^{i2\alpha t}}{\alpha_{III}} A_3 + \frac{e^{i2\alpha t}}{\alpha_{III}} A_5 \right] - \tau_M \Re [A_4 + A_6] + \Re \left[ \frac{e^{i2\alpha t}}{\alpha_I} A_5 \right] + \tau_M \Re [A_6] \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{R_U^2 U_T U_0 e^{S_R \tau_I}}{2S_R} \left( \frac{A_1}{\alpha} \sin \alpha t - \frac{1}{\alpha} \Im [A_4] + \frac{1}{\alpha} \Im [e^{i\alpha t} A_3] \right) \right. \\ &\quad \left. + \Re \left[ \frac{e^{i\alpha t}}{i\alpha} A_3 - \frac{A_1}{i\alpha} - \frac{A_4}{i\alpha} + \frac{e^{i\alpha t}}{i\alpha} A_1 \right] - \frac{\tau_M}{1 + \alpha^2 \tau_M^2} A_2 (\cos \alpha t + \alpha \tau_M \sin \alpha t) \right. \\ &\quad \left. - \frac{\tau_M}{1 + \alpha^2 \tau_M^2} \Re [e^{i\alpha t} A_3] - \frac{\alpha \tau_M^2}{1 + \alpha^2 \tau_M^2} \Im [e^{i\alpha t} A_3] \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{\tau_M}{1+\alpha^2\tau_M^2}A_1(\cos\alpha t+\alpha\tau_M\sin\alpha t)-\frac{\tau_M}{1+\alpha^2\tau_M^2}\Re[e^{i\alpha t}A_5] \\
& \quad -\frac{\alpha\tau_M^2}{1+\alpha^2\tau_M^2}\Im[e^{i\alpha t}A_5]-\Re\left[\frac{e^{i\alpha t}}{\alpha_I}A_5+\frac{e^{i\alpha t}}{\alpha_I}A_1\right] \\
& -\Re\left[\frac{e^{i\alpha t}}{\alpha_I}A_3+\frac{e^{i\alpha t}}{\alpha_I}A_2\right]+\frac{\tau_M}{4+\alpha^2\tau_M^2}A_2(2\cos\alpha t+\alpha\tau_M\sin\alpha t) \\
& +\frac{2\tau_M}{4+\alpha^2\tau_M^2}\Re[e^{i2\alpha t}A_5]+\frac{\alpha\tau_M^2}{4+\alpha^2\tau_M^2}\Im[e^{i2\alpha t}A_5]+\Re\left[\frac{e^{i\alpha t}}{\alpha_{II}}A_5+\frac{e^{i\alpha t}}{\alpha_{II}}A_2\right] \\
& +\frac{R_U^2U_0^2e^{S_R\tau_I}}{2S_R}(2A_1t-\tau_MA_2-\tau_MA_1-\tau_MA_1-\tau_MA_2+\tau_MA_2)+2k_BTRUt \\
& \quad -2k_BTRU\tau_M-2k_BTRU\tau_M+k_BTRU\tau_M\}
\end{aligned}$$

en donde se han definido  $\alpha_I = \frac{1}{\tau_M} + i\alpha$ ,  $\alpha_{II} = \frac{2}{\tau_M} + i\alpha$  y  $\alpha_{III} = \frac{1}{\tau_M} + i2\alpha$ . Simplificando y multiplicando por dos obtenemos la expresión completa para el MSD ya que el resultado anterior es solo para una de las dos componentes del MSD y debido a la simetría existente ambas componentes tienen la misma expresión.

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{x}(t) \cdot \mathbf{x}(t) \rangle & \cong \frac{1}{R_U^2} \left\{ \frac{R_U^2 U_T^2 e^{S_R \tau_I}}{2S_R} \left( \Re \left[ \frac{e^{i2\alpha t}}{i\alpha} A_3 - \frac{1}{i\alpha} A_4 \right] \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + \Re [A_4 + A_3] t - 2\Re \left[ \frac{e^{i2\alpha t}}{\alpha_{III}} A_5 + \frac{e^{i2\alpha t}}{\alpha_{III}} A_3 \right] \right. \right. \\
& \quad \left. \left. - 2\tau_M \Re [A_6 + A_4] + \Re \left[ \frac{e^{i2\alpha t}}{\alpha_I} A_5 \right] + \tau_M \Re [A_6] \right) \right. \\
& \quad \left. + \frac{R_U^2 U_T U_0 e^{S_R \tau_I}}{S_R} \left( \frac{A_1}{\alpha} \sin \alpha t + \frac{1}{\alpha} \Im [e^{i\alpha t} A_3 - A_4] \right) \right. \\
& \quad \left. + \Re \left[ \frac{e^{i\alpha t}}{i\alpha} A_3 - \frac{A_1}{i\alpha} - \frac{A_4}{i\alpha} + \frac{e^{i\alpha t}}{i\alpha} A_1 \right] - \frac{\tau_M}{1+\alpha^2\tau_M^2} (A_2 + A_1) (\cos \alpha t + \alpha\tau_M \sin \alpha t) \right. \\
& \quad \left. - \frac{\tau_M}{1+\alpha^2\tau_M^2} \Re [e^{i\alpha t} A_3 + e^{i\alpha t} A_5] - \frac{\alpha\tau_M^2}{1+\alpha^2\tau_M^2} \Im [e^{i\alpha t} A_3 + e^{i\alpha t} A_5] \right. \\
& \quad \left. - \Re \left[ \frac{e^{i\alpha t}}{\alpha_I} A_5 + \frac{e^{i\alpha t}}{\alpha_I} A_1 \right] - \Re \left[ \frac{e^{i\alpha t}}{\alpha_I} A_3 + \frac{e^{i\alpha t}}{\alpha_I} A_2 \right] \right. \\
& \quad \left. + \frac{\tau_M}{4+\alpha^2\tau_M^2} A_2 (2\cos\alpha t + \alpha\tau_M \sin\alpha t) + \frac{2\tau_M}{4+\alpha^2\tau_M^2} \Re [e^{i2\alpha t} A_5] \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\alpha\tau_M^2}{4 + \alpha^2\tau_M^2} \Im [e^{i2\alpha t} A_5] + \Re \left[ \frac{e^{i\alpha t}}{\alpha_{II}} A_5 + \frac{e^{i\alpha t}}{\alpha_{II}} A_2 \right] \\
& + \frac{R_U^2 U_0^2 e^{S_R \tau_I}}{S_R} (2A_1 t - \tau_M A_2 - 2\tau_M A_1) + 4k_B T R_U t - 6k_B T R_U \tau_M \} \quad (4.48)
\end{aligned}$$

Como ya se mencionó, el resultado anterior se obtiene al calcular cada integral y hacer el límite para tiempos grandes por separado, pero como se puede ver hay términos que dependen linealmente del tiempo por lo que para tiempos muy largos estos dominaran sobre los demás términos, entonces necesitamos volver hacer el límite para tiempos largos ( $t \sim \infty$ ) pero ahora para el resultado completo, por lo que finalmente el resultado tiende a lo siguiente

$$\langle \mathbf{x} \cdot \mathbf{x} \rangle \approx \frac{1}{R_U^2} \left[ \frac{R_U^2 U_T^2 e^{S_R \tau_I}}{2S_R} \Re [A_4 + A_3] + \frac{2R_U^2 U_0^2 e^{S_R \tau_I}}{S_R} A_1 + 4k_B T R_U \right] t \quad (4.49)$$

Utilizando la ecuación (2.9) se tiene que el coeficiente de difusión correspondiente a este primer caso, en donde la velocidad de propulsión es una función sinusoidal general, está dado por

$$D_{E0} \cong \frac{U_T^2 e^{S_R \tau_I}}{8S_R} \Re [A_4 + A_3] + \frac{U_0^2 e^{S_R \tau_I}}{2S_R} A_1 + D_T \quad (4.50)$$

en donde  $D_T$  es la difusión browniana clásica (2.11).

#### 4.4.1. Velocidad de propulsión periódica

Lo que realmente nos interesa es calcular el MSD para el caso más general de cuando la velocidad de propulsión es periódica, para ello hay que utilizar la fuerza de propulsión en términos de los coeficientes de Fourier (4.12) y sustituirlo en la expresión para la posición dada anteriormente (4.36), quedando así lo siguiente

$$\begin{aligned}
\mathbf{x}^{(N)}(t) = & \frac{1}{R_U} \left[ \int_0^t \mathbf{F}_s^N(t_1) dt_1 + \int_0^t \tilde{\mathbf{f}}(t_1) dt_1 \right. \\
& \left. - \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \mathbf{F}_s^N(t_1) dt_1 - \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \tilde{\mathbf{f}}(t_1) dt_1 \right]
\end{aligned}$$

Para poder realizar los cálculos correspondientes hay que sustituir el valor de la fuerza de propulsión

$$\mathbf{x}^{(N)}(t) = \frac{1}{R_U} \left[ \frac{R_U U_0 a_0}{2} \int_0^t \mathbf{e}(t_1) dt_1 + R_U U_0 \int_0^t \sum_{n=0}^N a_n \cos(n\omega t_1) \mathbf{e}(t_1) dt_1 \right]$$

$$\begin{aligned}
& +R_U U_0 \int_0^t \sum_{n=1}^N b_n \sin(n\omega t_1) \mathbf{e}(t_1) dt_1 + \int_0^t \tilde{\mathbf{f}}(t_1) dt_1 \\
& - \frac{R_U U_0 a_0}{2} \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \mathbf{e}(t_1) dt_1 - R_U U_0 \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \sum_{n=0}^N a_n \cos(n\omega t_1) \mathbf{e}(t_1) dt_1 \\
& - R_U U_0 \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \sum_{n=1}^N b_n \sin(n\omega t_1) \mathbf{e}(t_1) dt_1 - \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \tilde{\mathbf{f}}(t_1) dt_1 \Big]
\end{aligned}$$

debido a que la sumatoria es independiente de la integral podemos sacarla del integrando como se muestra a continuación

$$\begin{aligned}
\mathbf{x}^{(N)}(t) &= \frac{1}{R_U} \left[ \frac{R_U U_0 a_0}{2} \int_0^t \mathbf{e}(t_1) dt_1 + R_U U_0 \sum_{n=0}^N a_n \int_0^t \cos(n\omega t_1) \mathbf{e}(t_1) dt_1 \right. \\
& \quad \left. + R_U U_0 \sum_{n=1}^N b_n \int_0^t \sin(n\omega t_1) \mathbf{e}(t_1) dt_1 + \int_0^t \tilde{\mathbf{f}}(t_1) dt_1 \right. \\
& \quad \left. - \frac{R_U U_0 a_0}{2} \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \mathbf{e}(t_1) dt_1 - R_U U_0 \sum_{n=0}^N a_n \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \cos(n\omega t_1) \mathbf{e}(t_1) dt_1 \right. \\
& \quad \left. - R_U U_0 \sum_{n=1}^N b_n \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \sin(n\omega t_1) \mathbf{e}(t_1) dt_1 - \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \tilde{\mathbf{f}}(t_1) dt_1 \right]
\end{aligned}$$

Como en este sistema no se consideran fuerzas y torcas externas se tiene isotropía en el espacio por lo que el tensor del MSD está dado solo por las componentes de la diagonal que ademas son iguales, es decir,

$$\langle \mathbf{x}^{(N)}(t) \cdot \mathbf{x}^{(N)}(t) \rangle = \langle x_1^2(t) \rangle^{(N)} + \langle x_2^2(t) \rangle^{(N)} = 2 \langle x_1^2(t) \rangle^{(N)}$$

$$\langle x_1(t) x_2(t) \rangle^{(N)} = \langle x_2(t) x_1(t) \rangle^{(N)} = 0$$

el superíndice  $N$  hace referencia al número de sumas parciales de las sumatorias presentes en el MSD. Por comodidad utilizaremos la notación normal

$$\langle \mathbf{x}^{(N)}(t) \cdot \mathbf{x}^{(N)}(t) \rangle = \langle \mathbf{x}(t) \cdot \mathbf{x}(t) \rangle$$

$$\langle x_1^2(t) \rangle^{(N)} = \langle x_1^2(t) \rangle$$

entonces para referirnos al MSD que estamos tratando en esta subsección cada vez que se quiera hacer referencia sobre él, se mencionará como MSD general. Por lo que el MSD está dado por

$$\langle \mathbf{x}(t) \cdot \mathbf{x}(t) \rangle = 2 \langle x_1^2(t) \rangle \quad (4.51)$$

Se puede notar que solo faltaría calcular una de las componentes del MSD ( $\langle x_1^2(t) \rangle$ ) para conocer la expresión completa, por ello primero hay que mostrar explícitamente el valor de  $x_1(t)$ , que es

$$\begin{aligned} x_1(t) = & \frac{1}{R_U} \left[ \frac{R_U U_0 a_0}{2} \int_0^t e_1(t_1) dt_1 + R_U U_0 \sum_{n=0}^N a_n \int_0^t \cos(n\omega t_1) e_1(t_1) dt_1 \right. \\ & + R_U U_0 \sum_{n=1}^N b_n \int_0^t \sin(n\omega t_1) e_1(t_1) dt_1 + \int_0^t \tilde{\mathbf{f}}(t_1) dt_1 \\ & - \frac{R_U U_0 a_0}{2} \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} e_1(t_1) dt_1 - R_U U_0 \sum_{n=0}^N a_n \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \cos(n\omega t_1) e_1(t_1) dt_1 \\ & \left. - R_U U_0 \sum_{n=1}^N b_n \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \sin(n\omega t_1) e_1(t_1) dt_1 - \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \tilde{\mathbf{f}}(t_1) dt_1 \right] \end{aligned}$$

Lo siguiente es hacer el producto con sigo misma, se puede inferir que se obtienen 64 integrales dobles, luego se calcula el promedio de ese producto y debido a que la fuerza estocástica es estadísticamente independiente del vector de orientación ( $\langle \tilde{f}_i(t_1) e_j(t_2) \rangle = 0$ ) se anulan varias integrales reduciéndose a 48. Para poder simplificar los cálculos de las integrales es necesario utilizar las identidades trigonométricas relacionadas con el producto entre dos funciones seno o coseno las cuales son

$$\sin(x) \sin(y) = \frac{1}{2} [\cos(x - y) - \cos(x + y)]$$

$$\cos(x) \cos(y) = \frac{1}{2} [\cos(x + y) + \cos(x - y)]$$

$$\sin(x) \cos(y) = \frac{1}{2} [\sin(x + y) + \sin(x - y)]$$

$$\cos(x) \sin(y) = \frac{1}{2} [\sin(x + y) - \sin(x - y)]$$

utilizando estas identidades se simplifican las integrales, pero aumenta el número de las mismas obteniendo 64 integrales dobles, que además no son solo integrales si no

que son sumatorias de integrales dobles, lo cual nos hace ver que habría que resolver muchas integrales que por sí solas ya son complicadas de resolver como se puede apreciar en el Apéndice. Se tendrá que ver alguna forma de evitar tantos cálculos, pero antes veamos cómo queda la expresión para una de las componentes del MSD, el cual se muestra a continuación

$$\begin{aligned} \langle x_1^2(t) \rangle_N = & \frac{1}{R_U^2} [\Psi_1 - \Psi_2 - \Psi_3 + \Psi_4] + \frac{U_0^2}{2} [\Phi_0 + \Phi_1 + \Phi_2 + \Phi_3 - \Phi_4 - \Phi_5 - \Phi_6 - \Phi_7 \\ & + \Phi_8 + \Phi_9 + \Phi_{10} + \Phi_{11} - \Phi_{12} - \Phi_{13} - \Phi_{14} - \Phi_{15} + \Phi_{16} + \dots + \Phi_{59}] \end{aligned} \quad (4.52)$$

Debido a que son muchas integrales y la mayoría no contribuye al resultado final no se colocan sus expresiones.

#### 4.4.2. Tratamiento matemático

De los cálculos hechos en el caso que la velocidad de propulsión es una función sinusoidal sabemos que solo para algunas integrales se obtienen resultados lineales en el tiempo, los cuales dominaran a tiempos largos. De todas las integrales definidas en el caso general solamente unas son similares al tipo de integrales que arrojan resultados lineales, y estas se muestran a continuación

$$\begin{aligned} \phi_1 &= \int_0^t \int_0^t \cos(n\omega t_1 - \tilde{n}\omega t_2) \langle e_1(t_1)e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \\ \phi_2 &= \int_0^t \int_0^t \sin(n\omega t_1 - \tilde{n}\omega t_2) \langle e_1(t_1)e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \end{aligned}$$

Siguiendo los pasos descritos en el Apéndice, se puede mostrar que estas integrales tienen como solución las siguientes expresiones, para  $\phi_1$  es

$$\begin{aligned} \phi_1 = & \frac{e^{S_R \tau_I}}{2S_R} \Re \left[ \frac{e^{i[n-\tilde{n}]\omega t}}{i[n-\tilde{n}]\omega} \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R - i\tilde{n}\omega\tau_I - 1} \Gamma(S_R - i\tilde{n}\omega\tau_I, z_0(t), S_R) \right. \\ & - \frac{1}{i[n-\tilde{n}]\omega} \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R - i\tilde{n}\omega\tau_I - 1} \Gamma(S_R - i\tilde{n}\omega\tau_I, z_0(t), S_R) \\ & - \frac{1}{i[n-\tilde{n}]\omega} \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R + i\tilde{n}\omega\tau_I - 1} \Gamma(S_R + i\tilde{n}\omega\tau_I, z_0(t), S_R) \\ & \left. + \frac{e^{i[n-\tilde{n}]\omega t}}{i[n-\tilde{n}]\omega} \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R + i\tilde{n}\omega\tau_I - 1} \Gamma(S_R + i\tilde{n}\omega\tau_I, z_0(t), S_R) \right] \end{aligned}$$

y para  $\phi_2$  es de la misma forma solo se cambia la parte real por la parte imaginaria, por lo que

$$\begin{aligned} \phi_2 = & \frac{e^{S_R \tau_I}}{2S_R} \Im \left[ \frac{e^{i[n-\tilde{n}]\omega t}}{i[n-\tilde{n}]\omega} \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R-i\tilde{n}\omega\tau_I-1} \Gamma(S_R - i\tilde{n}\omega\tau_I, z_0(t), S_R) \right. \\ & - \frac{1}{i[n-\tilde{n}]\omega} \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R-i\omega\tau_I-1} \Gamma(S_R - i\omega\tau_I, z_0(t), S_R) \\ & - \frac{1}{i[n-\tilde{n}]\omega} \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R+i\tilde{n}\omega\tau_I-1} \Gamma(S_R + i\tilde{n}\omega\tau_I, z_0(t), S_R) \\ & \left. + \frac{e^{i[n-\tilde{n}]\omega t}}{i[n-\tilde{n}]\omega} \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R+i\omega\tau_I-1} \Gamma(S_R + i\omega\tau_I, z_0(t), S_R) \right] \end{aligned}$$

Si se observan los resultados para  $\phi_1$  y  $\phi_2$  se puede ver que no son lineales en el tiempo, además podemos notar que en el caso que  $n = \tilde{n}$  el resultado se indetermina, por ello hay que tratar este caso particular de forma independiente resolviendo la integral desde el comienzo.

Cuando  $n = \tilde{n}$ , se simplifican  $\phi_1$  y  $\phi_2$

$$\begin{aligned} \phi_{1,n=\tilde{n}} &= \int_0^t \int_0^t \cos(n\omega[t_1 - t_2]) \langle q_1(t_1)q_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \\ \phi_{2,n=\tilde{n}} &= \int_0^t \int_0^t \sin(n\omega[t_1 - t_2]) \langle q_1(t_1)q_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \end{aligned}$$

pero la primera integral se resolvió en los cálculos para el caso de una velocidad de propulsión sinusoidal en donde se definió como

$$\Psi_{18} = \int_0^t \int_0^t \cos(\alpha[t_1 - t_2]) \langle q_1(t_1)q_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1$$

se puede observar que  $\phi_{1,n=\tilde{n}}$  y  $\Psi_{18}$  son la misma integral y en el caso de la primera el término  $n\omega$  hace el papel de  $\alpha$  de la segunda integral. Utilizando el procedimiento descrito en el Apéndice la solución a tiempos largos para esta última es

$$\begin{aligned} \Psi_{18} \cong & \frac{e^{S_R \tau_I}}{2S_R} \Re \left[ \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R-i\alpha\tau_I-1} \Gamma(S_R - i\alpha\tau_I, 0, S_R) \right. \\ & \left. + \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R+i\alpha\tau_I-1} \Gamma(S_R + i\alpha\tau_I, 0, S_R) \right] t \end{aligned}$$

entonces la solución a tiempos largos ( $t \rightarrow \infty$ ) para  $\phi_{1,n=\tilde{n}}$  será

$$\phi_{1,n=\tilde{n}} \cong \frac{e^{S_R \tau_I}}{2S_R} \Re \left[ \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R-i\omega\tau_I-1} \Gamma(S_R - i\omega\tau_I, 0, S_R) \right]$$



$$+ \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R + in\omega\tau_I - 1} \Gamma(S_R + in\omega\tau_I, 0, S_R) \Big] t$$

ahora, sabemos que la solución de  $\phi_{2,n=\tilde{n}}$  es muy similar al anterior solo difiere en que para este caso se toma la parte imaginaria en vez de la real, es decir,

$$\begin{aligned} \phi_{2,n=\tilde{n}} \cong & \frac{e^{S_R\tau_I}}{2S_R} \Im \left[ \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R - in\omega\tau_I - 1} \Gamma(S_R - in\omega\tau_I, 0, S_R) \right. \\ & \left. + \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R + in\omega\tau_I - 1} \Gamma(S_R + in\omega\tau_I, 0, S_R) \right] t \end{aligned}$$

para reducir las soluciones se hacen las siguientes definiciones

$$\begin{aligned} A_I &= \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R + in\omega\tau_I - 1} \Gamma(S_R + in\omega\tau_I, 0, S_R) \\ A_{II} &= \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R - in\omega\tau_I - 1} \Gamma(S_R - in\omega\tau_I, 0, S_R) \end{aligned}$$

por tanto

$$\begin{aligned} \phi_{1,n=\tilde{n}} &\cong \frac{e^{S_R\tau_I}}{2S_R} \Re [A_I + A_{II}] t \\ \phi_{2,n=\tilde{n}} &\cong \frac{e^{S_R\tau_I}}{2S_R} \Im [A_I + A_{II}] t \end{aligned}$$

resumiendo esto último, tenemos que existe una contribución lineal en el tiempo de las integrales  $\phi_1$  y  $\phi_2$  pero solo en el caso que  $n = \tilde{n}$ . Por lo tanto, conviene reescribir la ecuación (4.52) en términos de los elementos que contribuyen a tiempos largos más el resto de términos, por tal motivo hacemos la siguiente definición

$$\begin{aligned} \Phi^{REST} \equiv & \Phi_1 + \Phi_3 - \Phi_5 - \Phi_6 - \Phi_7 + \Phi_8 + \Phi_9 - \Phi_{12} - \Phi_{13} - \Phi_{14} - \Phi_{15} \\ & + \Phi_{16} - \Phi_{17} - \Phi_{18} - \Phi_{19} + \Phi_{20} + \cdots + \Phi_{59} \end{aligned}$$

con esto la ecuación (4.52) se puede expresar de la siguiente forma

$$\begin{aligned} \langle x_1^2(t) \rangle_N &= \frac{1}{R_U^2} [\Psi_1 - \Psi_2 - \Psi_3 + \Psi_4] \\ &+ \frac{U_0^2}{2} [\Phi_0 + \Phi_2 - \Phi_4 + \Phi_{10} + \Phi_{11} + \Phi^{REST}] \end{aligned} \quad (4.53)$$

Las soluciones de  $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \Psi_4$  y  $\Phi_0$  ya son conocidas, mientras que las de  $\Phi_2, \Phi_4, \Phi_{10}$  y  $\Phi_{11}$  se escribirán en forma integral para tratar las dobles sumatorias.

$$\begin{aligned}
\langle x_1^2(t) \rangle_N &= \frac{1}{R_U^2} [2k_B T R_U t - 2k_B T R_U \tau_M - 2k_B T R_U \tau_M + k_B T R_U \tau_M] \\
&\quad + \frac{U_0^2}{2} \left[ \frac{\alpha_0^2 e^{S_R \tau_I}}{2S_R} t \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R-1} \Gamma(S_R, 0, S_R) + \Phi^{REST} \right. \\
&\quad + \sum_{n=1}^N \sum_{\tilde{n}=1}^N \alpha_n \alpha_{\tilde{n}} \int_0^t \int_0^t \cos(n\omega t_1 - \tilde{n}\omega t_2) \langle e_1(t_1) e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \\
&\quad - \sum_{n=1}^N \sum_{\tilde{n}=1}^N \alpha_n b_{\tilde{n}} \int_0^t \int_0^t \sin(n\omega t_1 - \tilde{n}\omega t_2) \langle e_1(t_1) e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \\
&\quad + \sum_{n=1}^N \sum_{\tilde{n}=1}^N b_n \alpha_{\tilde{n}} \int_0^t \int_0^t \sin(n\omega t_1 - \tilde{n}\omega t_2) \langle e_1(t_1) e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \\
&\quad \left. + \sum_{n=1}^N \sum_{\tilde{n}=1}^N b_n b_{\tilde{n}} \int_0^t \int_0^t \cos(n\omega t_1 - \tilde{n}\omega t_2) \langle e_1(t_1) e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \right] \quad (4.54)
\end{aligned}$$

Tomando en cuenta que el caso en el que se tiene una contribución lineal en el tiempo es cuando  $n = \tilde{n}$ , se puede reescribir la expresión anterior como

$$\begin{aligned}
\langle x_1^2(t) \rangle_N &= \frac{1}{R_U^2} [2k_B T R_U t - 3k_B T R_U \tau_M] + \frac{U_0^2}{2} \left[ \frac{\alpha_0^2 e^{S_R \tau_I}}{2S_R} t \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R-1} \Gamma(S_R, 0, S_R) \right. \\
&\quad + \sum_{h=1}^N \alpha_h^2 \int_0^t \int_0^t \cos(h\omega [t_1 - t_2]) \langle q_1(t_1) q_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 + \sum_1^{REST} \\
&\quad - \sum_{h=1}^N \alpha_h b_h \int_0^t \int_0^t \sin(h\omega [t_1 - t_2]) \langle e_1(t_1) e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 - \sum_2^{REST} \\
&\quad + \sum_{h=1}^N b_h \alpha_h \int_0^t \int_0^t \sin(h\omega [t_1 - t_2]) \langle e_1(t_1) e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 + \sum_3^{REST} \\
&\quad \left. + \sum_{h=1}^N b_h^2 \int_0^t \int_0^t \cos(h\omega [t_1 - t_2]) \langle e_1(t_1) e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 + \sum_4^{REST} + \Phi^{REST} \right]
\end{aligned}$$

donde  $\sum_1^{REST}$ ,  $\sum_2^{REST}$ ,  $\sum_3^{REST}$  y  $\sum_4^{REST}$  son términos que no contribuyen a tiempos largos, y además el subíndice está sujeta a la siguiente condición

$$h = \begin{cases} n & \text{si } n = \tilde{n} \\ \text{ignorar} & \text{en otro caso} \end{cases}$$

note que hay dos términos que se anulan

$$\begin{aligned} \langle x_1^2(t) \rangle_N &= \frac{1}{R_U^2} [2k_B T R_U t - 3k_B T R_U \tau_M] + \frac{U_0^2}{2} \left[ \frac{\alpha_0^2 e^{S_R \tau_I} t}{2S_R} \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R-1} \Gamma(S_R, 0, S_R) \right. \\ &\quad + \sum_{h=1}^N \alpha_h^2 \int_0^t \int_0^t \cos(h\omega [t_1 - t_2]) \langle e_1(t_1) e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \\ &\quad + \sum_{h=1}^N b_h^2 \int_0^t \int_0^t \cos(h\omega [t_1 - t_2]) \langle e_1(t_1) e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \\ &\quad \left. + \sum_1^{REST} + \sum_2^{REST} + \sum_3^{REST} + \sum_4^{REST} + \Phi^{REST} \right] \end{aligned}$$

como se puede apreciar solo hay una doble integral que va a contribuir a tiempos largos y cuya solución ya conocemos, por lo que

$$\begin{aligned} \langle x_1^2(t) \rangle_N &\cong \frac{1}{R_U^2} [2k_B T R_U t - 3k_B T R_U \tau_M] + \frac{U_0^2}{2} \left[ \frac{\alpha_0^2 e^{S_R \tau_I} t}{2S_R} \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R-1} \Gamma(S_R, 0, S_R) \right. \\ &\quad + \sum_{h=1}^N \alpha_h^2 \left( \frac{e^{S_R \tau_I}}{2S_R} \Re [A_I + A_{II}] t \right) + \sum_{h=1}^N b_h^2 \left( \frac{e^{S_R \tau_I}}{2S_R} \Re [A_I + A_{II}] t \right) \\ &\quad \left. + \sum_1^{REST} + \sum_2^{REST} + \sum_3^{REST} + \sum_4^{REST} + \Phi^{REST} \right] \end{aligned}$$

haciendo el límite  $t \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} \langle x_1^2(t) \rangle_N &\approx \frac{2k_B T}{R_U} t + \frac{U_0^2 e^{S_R \tau_I}}{4S_R} \left( \alpha_0^2 \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R-1} \Gamma(S_R, 0, S_R) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{n=1}^N \alpha_n^2 \Re [A_I + A_{II}] + \sum_{n=1}^N b_n^2 \Re [A_I + A_{II}] \right) t \end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned} A_I &= \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R + in\omega\tau_I - 1} \Gamma(S_R + in\omega\tau_I, 0, S_R) \\ A_{II} &= \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R - in\omega\tau_I - 1} \Gamma(S_R - in\omega\tau_I, 0, S_R) \end{aligned}$$

debido a la condición de  $h$  al hacer el límite a tiempos largos  $h \rightarrow n$ . Para obtener la expresión completa del MSD solo falta sustituir el resultado anterior en la ecuación (4.51), haciendo eso finalmente se llega a que

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}(t) \cdot \mathbf{x}(t) \rangle_N \approx & \left[ \frac{4k_B T}{R_U} + \frac{U_0^2 e^{S_R \tau_I}}{2S_R} \left( \alpha_0^2 \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R-1} \Gamma(S_R, 0, S_R) \right. \right. \\ & \left. \left. + \sum_{n=1}^N \alpha_n^2 \Re[A_I + A_{II}] + \sum_{n=1}^N b_n^2 \Re[A_I + A_{II}] \right) \right] t \end{aligned} \quad (4.55)$$

que cuenta entre sus términos con la función gamma incompleta generalizada que se define en (4.47). Se puede probar que la parte real de  $A_I$  y  $A_{II}$  son iguales, tomando eso en cuenta y simplificando la expresión se obtiene que

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}(t) \cdot \mathbf{x}(t) \rangle \cong & \left[ 4D_T + \frac{U_0^2 e^{S_R}}{D_\Omega} \left( \frac{\alpha_0^2}{2} \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R-1} \Gamma(S_R, 0, S_R) \right. \right. \\ & \left. \left. + \sum_{n=1}^N (\alpha_n^2 \Re[A_n] + b_n^2 \Re[A_n]) \right) \right] t \end{aligned} \quad (4.56)$$

donde  $D_T$  y  $D_\Omega$  son los coeficientes de difusión traslacional y rotacional, en el límite sobreamortiguado toman la siguiente forma  $D_T = k_B T / R_U$  y  $D_\Omega = k_B T / R_\Omega$ , mientras que

$$A_n = \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R + i n \omega \tau_I - 1} \Gamma(S_R + i n \omega \tau_I, 0, S_R)$$

Lo que nos falta es expresar estos resultados en términos de cantidades reales, es decir, hay que calcular la parte real de  $A_n$ , lo cual se hace en el Apéndice. Entonces  $\Re[A_n]$  queda como se muestra a continuación.

$$\Re[A_n] = \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R-1} [C_n R_n - S_n I_n]$$

Sustituyendo en la expresión para el MSD general se obtiene su expresión final, el cual ya queda en términos de cantidades reales definidas en el Apéndice.

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} \cdot \mathbf{x} \rangle \cong & \left[ 4D_T + \frac{U_0^2 e^{S_R}}{D_\Omega} \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R-1} \left( \frac{\alpha_0^2}{2} \Gamma(S_R, 0, S_R) \right. \right. \\ & \left. \left. + \sum_{n=1}^N (\alpha_n^2 [C_n R_n - S_n I_n] + b_n^2 [C_n R_n - S_n I_n]) \right) \right] t \end{aligned} \quad (4.57)$$

en donde

$$C_n = \cos \left[ n \omega \tau_I \ln \left( \frac{1}{S_R} \right) \right] \quad (4.58)$$

$$S_n = \sin \left[ n \omega \tau_I \ln \left( \frac{1}{S_R} \right) \right] \quad (4.59)$$

$$R_n = \Re [\Gamma (S_R + in\omega\tau_I, 0, S_R)] \quad (4.60)$$

$$I_n = \Im [\Gamma (S_R + in\omega\tau_I, 0, S_R)] \quad (4.61)$$

Por último, se procede a calcular el coeficiente de difusión efectiva, como el resultado del MSD depende linealmente del tiempo se puede aplicar la ecuación (2.9), obteniendo así lo siguiente

$$D_{Eg} \cong D_T + \frac{U_0^2 e^{S_R}}{4D_\Omega} \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R-1} \left( \frac{\alpha_0^2}{2} \Gamma (S_R, 0, S_R) + \sum_{n=1}^N (\alpha_n^2 [C_n R_n - S_n I_n] + b_n^2 [C_n R_n - S_n I_n]) \right) \quad (4.62)$$

Esta última expresión es el coeficiente de difusión para una partícula estocástica activa con inercia que no interactúa y con velocidad de propulsión periódica. Algo interesante que nos indica esta expresión es que la difusión de este tipo de sistemas es normal independientemente de que tipo de velocidad periódica tenga la partícula.

## 4.5. Casos particulares

### 4.5.1. Velocidad de propulsión tipo coseno

En este caso la velocidad de propulsión de la partícula activa estará dada por la siguiente función

$$U(t) = U_0 \cos \omega t \quad (4.63)$$

Este caso es interesante ya que es una extensión de un trabajo previo [82], en donde se estudia la misma velocidad de propulsión solo que en el caso sobreamortiguado. A continuación se procede a calcular los coeficientes de Fourier utilizando las definiciones (4.7), (4.8) y (4.9), para ello primero hay que identificar la función  $\xi_N(t)$ , se puede notar que  $\xi_N(t) = \cos \omega t$ . Los cálculos de estos coeficientes se pueden ver en el Apéndice, en el que se obtuvo que  $\alpha_0 = 0$ ,  $b_n = 0$  y  $\alpha_1 = 1$  mientras que los demás  $\alpha_n = 0$ . Esto era de esperar ya que la función (4.63) ya es periódica y su gráfica se presenta a continuación

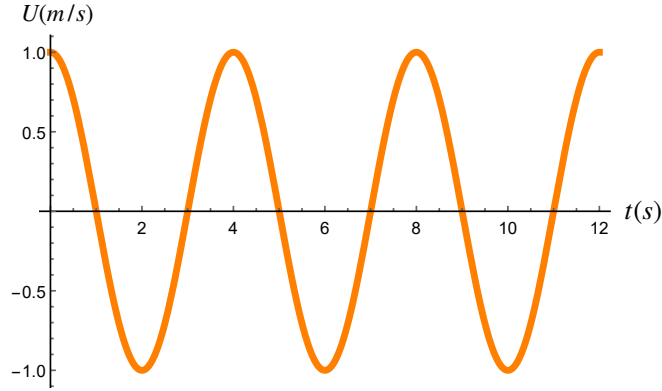


Figura 4.5: Gráfica de velocidad de propulsión tipo coseno vs tiempo con  $T = 4$  s y  $U_0 = 1$  m/s.

Ahora se sustituyen los coeficientes obtenidos en la expresión para el MSD general

$$\langle \mathbf{x} \cdot \mathbf{x} \rangle \cong \left[ 4D_T + \frac{U_0^2 e^{S_R}}{D_\Omega} \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R-1} [C_1 R_1 - S_1 I_1] \right] t \quad (4.64)$$

donde

$$C_1 = \cos \left[ \omega \tau_I \ln \left( \frac{1}{S_R} \right) \right]$$

$$S_1 = \sin \left[ \omega \tau_I \ln \left( \frac{1}{S_R} \right) \right]$$

$$R_1 = \Re \left[ \Gamma(S_R + i\omega \tau_I, 0, S_R) \right]$$

$$I_1 = \Im \left[ \Gamma(S_R + i\omega \tau_I, 0, S_R) \right]$$

El coeficiente de difusión efectiva para este caso es

$$D_{E1} \cong \frac{U_0^2 e^{S_R}}{4D_\Omega} \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R-1} [C_1 R_1 - S_1 I_1] + D_T \quad (4.65)$$

#### 4.5.2. Velocidad de propulsión tipo onda cuadrada

Un caso que puede ser interesante es cuando la velocidad de propulsión es una función tipo onda cuadrada como se muestra enseguida

$$U(t) = U_0 \times \begin{cases} 1 & \text{para } mT < t \leq (m + \frac{1}{2})T \\ 0 & \text{para } (m + \frac{1}{2})T < t \leq (m + 1)T \end{cases} \quad \text{con } m = 0, 1, 2, \dots, \quad (4.66)$$

Resulta sencillo identificar la función que aproximaremos con  $\xi_N(t)$  ya que es el término que multiplica a  $U_0$ . Esta función quiere decir que la velocidad de la partícula activa se prende, permanece constante por un intervalo de tiempo igual a  $T/2$ , se apaga durante un tiempo igual al tiempo que permanece prendido, después se vuelve a prender y así sucesivamente. Esto se puede apreciar mediante la siguiente gráfica

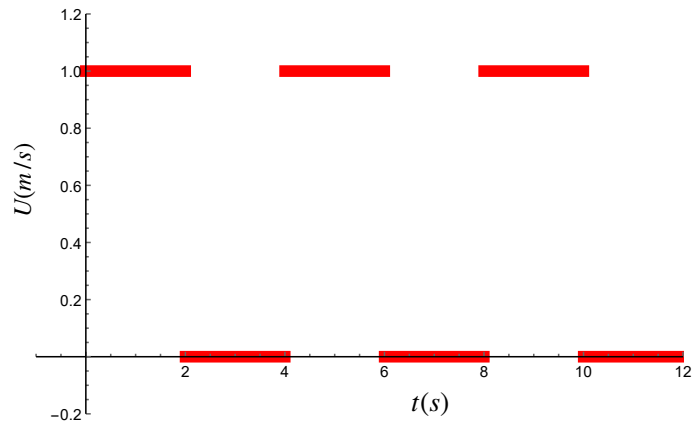


Figura 4.6: Gráfica de velocidad de propulsión tipo onda cuadrada vs tiempo con  $T = 4$  s y  $U_0 = 1$  m/s.

si sustituimos estos valores en (4.10) y se toma  $N = 5$ , es decir, los primeros cinco coeficientes de Fourier se puede observar que se aproxima a la onda cuadrada como se observa a continuación.

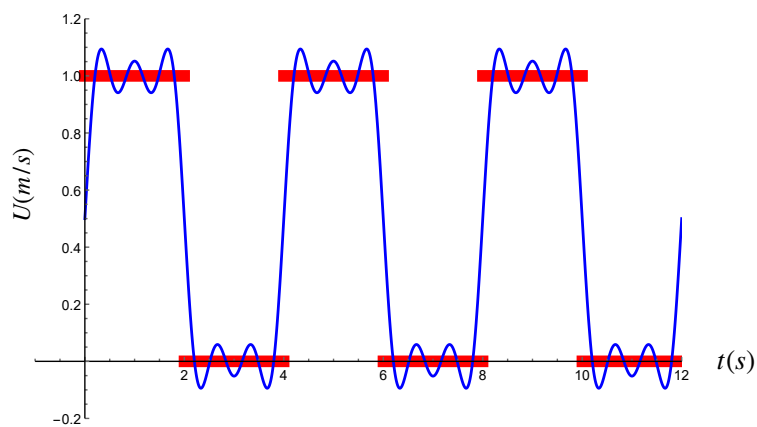


Figura 4.7: Superposición de la función onda cuadrada y la función obtenida con  $N = 5$  en la serie de Fourier.

Para una mejor aproximación se toman más coeficientes de Fourier, por ejemplo, para  $N = 30$  la aproximación es aún mejor como se ve en la siguiente gráfica.

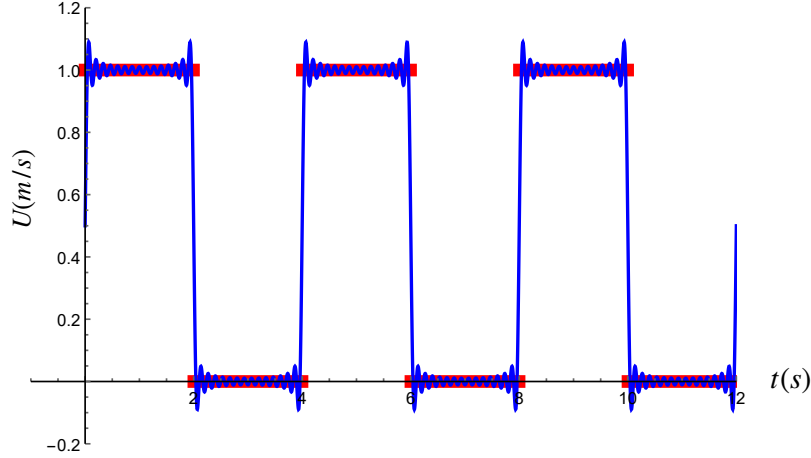


Figura 4.8: Superposición de la función onda cuadrada y la función obtenida con  $N = 30$  en la serie de Fourier.

Por lo tanto, si se sustituye los coeficientes de Fourier correspondientes (ver Apéndice) en la expresión para el MSD general, resulta que el MSD para la función onda cuadrada está dada por

$$\langle \mathbf{x} \cdot \mathbf{x} \rangle \cong \left[ 4D_T + \frac{U_0^2 e^{S_R}}{D_\Omega} \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R-1} \left( \frac{1}{2} \Gamma(S_R, 0, S_R) + \sum_{n=1}^N b_n^2 [C_n R_n - S_n I_n] \right) \right] t \quad (4.67)$$

donde

$$b_n = \frac{1}{n\pi} \left( \frac{1}{\mathfrak{M} + 1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} [1 - (-1)^{2n(m+\frac{1}{2})}]$$

mientras que  $C_n$ ,  $R_n$ ,  $S_n$  e  $I_n$  están dadas por (4.58), (4.59), (4.60) y (4.61). Hay que recordar que  $\mathfrak{M}$  es un número entero que depende del valor del tiempo ya que se debe cumplir que  $\mathfrak{M}T < t \leq (\mathfrak{M} + 1)T$ .

Para este caso el coeficiente de difusión efectiva es la siguiente

$$D_{E2} \cong \frac{U_0^2 e^{S_R}}{4D_\Omega} \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R-1} \left( \frac{1}{2} \Gamma(S_R, 0, S_R) + \sum_{n=1}^N b_n^2 [C_n R_n - S_n I_n] \right) + D_T \quad (4.68)$$



### 4.5.3. Velocidad de propulsión tipo zigzag

Otro caso que puede ser interesante es cuando la velocidad de propulsión se comporta como una onda tipo zigzag que queda descrita por la siguiente función

$$U(t) = U_0 \times \begin{cases} t - mT & \text{para } mT < t \leq (m + \frac{1}{2})T \\ (m + 1)T - t & \text{para } (m + \frac{1}{2})T < t \leq (m + 1)T \end{cases} \quad \text{con } m = 0, 1, 2, \dots, \quad (4.69)$$

lo anterior nos dice que la partícula incrementaría su velocidad partiendo del reposo de forma lineal durante un intervalo de tiempo igual a  $T/2$ , después disminuiría de forma lineal durante un tiempo igual a  $T/2$  y se repetiría el ciclo de forma periódica. Para apreciar este comportamiento de manera visual se presenta la Figura 4.9, en la que está graficada la magnitud de la velocidad de propulsión contra el tiempo.

Tomando  $N = 2$  en la serie de Fourier (4.10) se obtiene una primera aproximación la cual ya es muy semejante a la función que se desea estudiar cómo se puede notar en la Figura 4.10, aunque si se llega apreciar una diferencia con la función original, lo cual era de esperar ya que se tomó un número pequeño para  $N$ . Como ya sabemos para tener una mejor aproximación se toma  $N$  cada vez más grande y de hecho para este caso no es necesario tomar números muy grandes, con  $N = 15$  ya se tiene una muy buena aproximación a la función original que es una función periódica tipo zigzag, como se puede observar en la Figura 4.11.

Al igual que en los casos anteriores, para obtener el desplazamiento cuadrático medio para este caso solo hay que sustituir los coeficientes en la expresión para el MSD general, este cálculo se encuentra en el Apéndice. Haciendo la sustitución mencionada se obtiene que el MSD para partículas activas inerciales con una velocidad de propulsión tipo zigzag está dada por

$$\langle \mathbf{x} \cdot \mathbf{x} \rangle \cong \left[ 4D_T + \frac{U_0^2 e^{S_R}}{D_\Omega} \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R-1} \left( \frac{T^2}{8} \Gamma(S_R, 0, S_R) + \sum_{n=1}^N \alpha_n^2 [C_n R_n - S_n I_n] \right) \right] t \quad (4.70)$$

donde

$$\alpha_n = \frac{T}{(\pi n)^2} \left( \frac{1}{\mathfrak{M} + 1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ (-1)^{2n(m+\frac{1}{2})} - 1 \right]$$

mientras que  $C_n$ ,  $R_n$ ,  $S_n$  e  $I_n$  están dadas por (4.58), (4.59), (4.60) y (4.61). A la hora de hacer cálculos es importante tomar en cuenta que  $\mathfrak{M}$  es un número entero que depende del valor del tiempo.

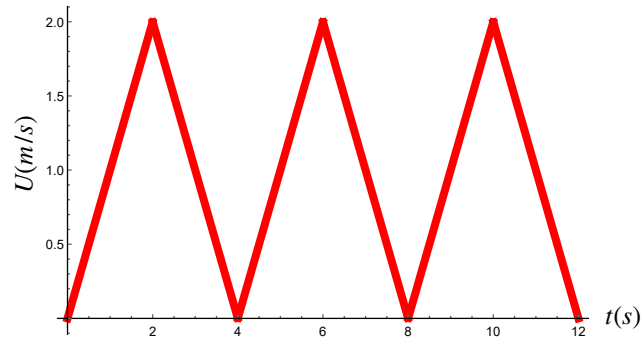


Figura 4.9: Gráfica de velocidad de propulsión tipo zigzag vs tiempo con  $T = 4$  s y  $U_0 = 1$  m/s.

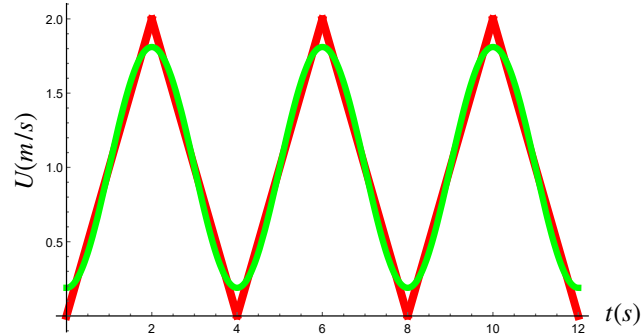


Figura 4.10: Superposición de la velocidad de propulsión tipo zigzag con la serie de Fourier con  $N = 2$ .

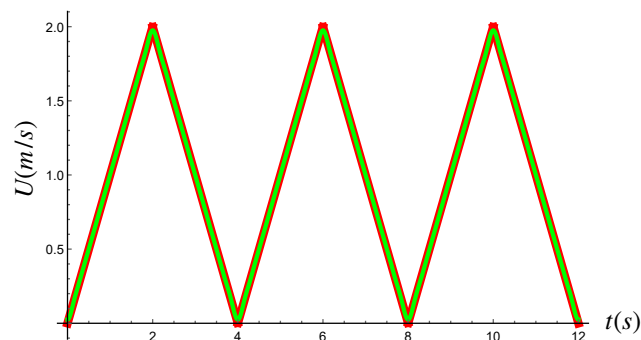


Figura 4.11: Superposición de la velocidad de propulsión tipo zigzag con la serie de Fourier con  $N = 15$ .

El coeficiente de difusión efectiva correspondiente a este caso es

$$D_{E3} \cong \frac{U_0^2 e^{S_R}}{4D_\Omega} \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R-1} \left( \frac{T^2}{8} \Gamma(S_R, 0, S_R) + \sum_{n=1}^N \alpha_n^2 [C_n R_n - S_n I_n] \right) + D_T \quad (4.71)$$

Tanto este caso particular como los anteriores se calcularon para mostrar la utilidad de contar con una expresión general para velocidades de propulsión periódicas, ya que solo se tuvo que calcular los coeficientes de Fourier correspondientes. Estos cálculos se hicieron a manera de ejemplo para concluir con este capítulo, no se tuvo como objetivo hacer un análisis más detallado sobre los casos particulares. Sin embargo, un caso sobre el cual vale la pena hacer unas observaciones es el caso en que se tiene una velocidad de propulsión tipo coseno o recíproca, ya que este ha sido estudiado en otros trabajos para el caso sobreamortiguado.

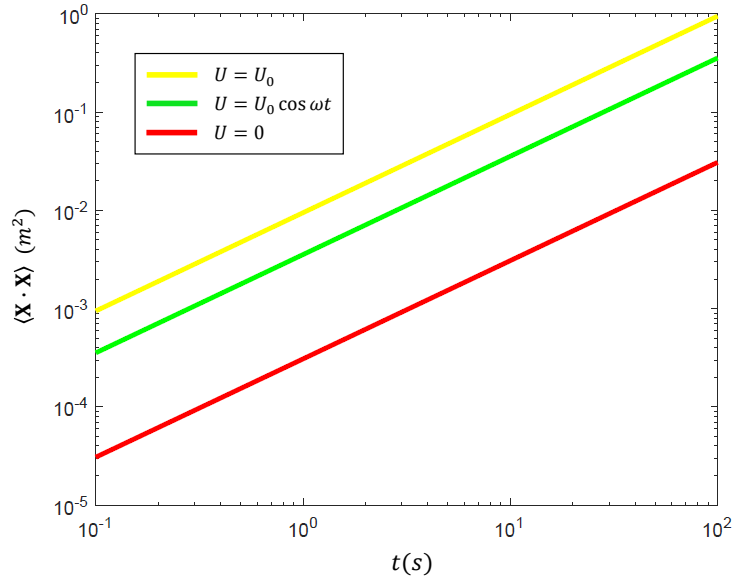


Figura 4.12: Comparación del MSD para tres velocidades de propulsión distintas de partículas estocásticas inerciales que no interactúan. La línea continua roja corresponde al caso sobreamortiguado en el que la velocidad de propulsión es nula ( $U = 0$ ), la línea continua verde claro corresponde a una velocidad de propulsión recíproca ( $U = U_0 \cos \omega t$ ) y la línea continua amarilla corresponde al caso más común que es el de una velocidad de propulsión constante ( $U = U_0$ ). Los datos utilizados para realizar la gráfica fueron  $U_0=0.093$  m/s,  $M = 4 \times 10^{-3}$  kg,  $I=1.46 \times 10^{-7}$  kgm<sup>2</sup>,  $D_T=7.7 \times 10^{-5}$  m<sup>2</sup>/s,  $D_\Omega=2.7$  s<sup>-1</sup>,  $\tau_I=0.194$  s y para el caso de la velocidad recíproca  $T = 4$  s, la mayoría de estos datos se obtuvieron de los experimentos de Scholz [4] sobre vibrobots (sistema experimental de partículas activas inerciales).

Como se puede ver en la gráfica de la figura 4.12, contar con una velocidad de propulsión recíproca ( $U = U_0 \cos \omega t$ ) en un medio fluctuante aumenta la difusión de las partículas comparado con una partícula pasiva ( $U = 0$ ) del mismo tamaño, tal y como ha sido reportado [82]. En la misma gráfica se puede observar que si la partícula cuenta con una velocidad constante ( $U = U_0$ ) este tendrá una difusión mayor a la conseguida con una velocidad de propulsión recíproca lo cual era de esperar ya que también fue reportado para el caso sobreamortiguado [82]. Esto es una muestra de la consistencia de nuestros resultados. De hecho, si se aumenta el periodo de la velocidad de propulsión recíproca la difusión también aumenta, pero siempre es menor a la difusividad conseguida con una velocidad constante de la misma magnitud.

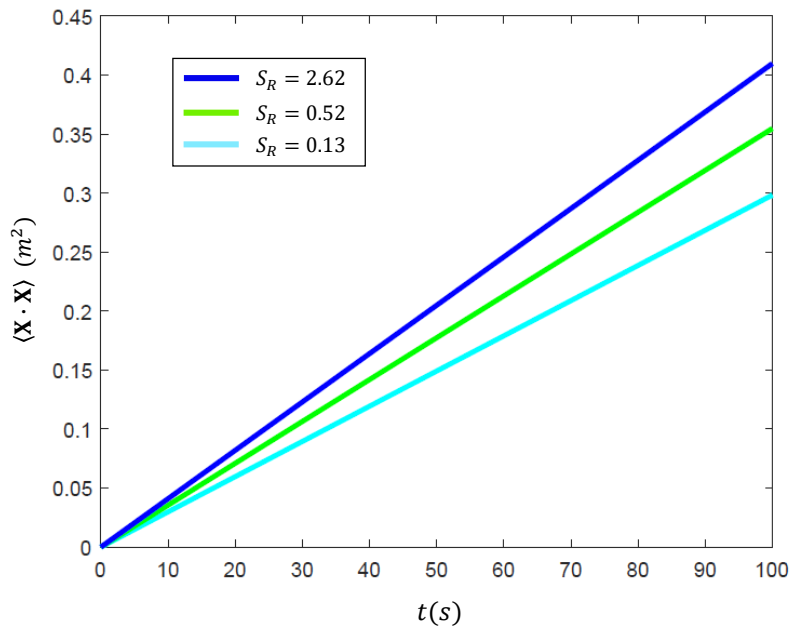


Figura 4.13: Desplazamiento cuadrático medio (MSD) de un sistema de partículas activas inerciales que no interactúan con velocidad de propulsión recíproca ( $U = U_0 \cos \omega t$ ) para diferentes valores del número de Stokes rotacional,  $S_R = \{0.13, 0.52, 2.62\}$ . Los datos utilizados para realizar el gráfico fueron tomados nuevamente de los experimentos de Scholz [4] y lo que se varió fue la masa ( $M$ ). Esta figura muestra que la difusividad aumenta a medida que aumenta la inercia ya que esta es proporcional al número de Stokes rotacional ( $S_R \propto M$ ).

Algo que también resulta interesante analizar es el efecto de la inercia, para ello en la gráfica de la Fig. 4.13 se muestra el MSD cuando se tiene velocidad de propulsión recíproca para diferentes valores de  $S_R$ , el cual es proporcional a la masa ( $S_R \propto M$ ). Para esta gráfica se tomaron los datos del experimento de Scholz [4] sobre vibrobots, dejando todas las variables fijas y variando la masa, de hecho, la línea continua de color verde claro en la figura 4.13 corresponde al MSD con la masa del vibrobot de

Scholz. La primera variación que se hizo fue disminuir el valor de la masa obteniendo una difusión menor (ver línea color cian claro en la Fig. 4.13), después se aumentó el valor de la masa obteniendo una difusión mayor (ver línea color azul en la Fig. 4.13), los datos de las masas y los números de Stokes se presentan en la tabla de la Fig. 4.14. Tomando en cuenta lo anterior y observando la figura 4.13, se puede notar que entre mayor sea la inercia de las partículas activas mayor será su difusión debido a que la partícula se resistirá más a las fuerzas de arrastre del medio logrando un mayor avance. Algo que también es interesante de la Fig. 4.13 es que las variaciones del número de Stokes ( $S_R$ ) son pequeñas, pero aun así el efecto de la inercia es apreciable.

$M$ (kg)	$\tau_I$ (s)	$S_R$
0.001	0.048	0.13
0.004	0.194	0.52
0.02	0.97	2.62

Figura 4.14: Tabla de las masas que se utilizaron para la gráfica de la Fig. 4.13, con los valores correspondientes a  $\tau_I$  y  $S_R$ , ya que estos son proporcionales a la masa ( $M$ ). La masa intermedia  $M = 0.004$  Kg es la que corresponde al vibrobot de Scholz [4], la cual se varió disminuyendo y aumentando su valor, obteniendo así los otros dos números de Stokes rotacionales ( $S_R$ ).

Se puede hacer un análisis similar a este para los otros casos particulares, pero como se mencionó anteriormente ese no es el objetivo de este capítulo si no que el objetivo principal fue obtener una expresión general del MSD para partículas activas estocásticas que no interactúan, esta meta fue alcanzada con la expresión (4.57). Ahora, basándonos en este último análisis y en trabajos anteriores se esperaría que las difusiones para partículas activas con cualquier velocidad de propulsión periódica fuesen menores al conseguido con una velocidad de propulsión constante de la misma magnitud, pero mayores a las de una partícula pasiva bajo las mismas condiciones, y para estos sistemas entre más inercia tenga la partícula su difusión será mayor.



# Capítulo 5

## Conclusiones

En el trabajo presentando se estudiaron sistemas de partículas activas estocásticas inerciales que no interactúan, empezando con un sistema experimental de un robot hexbug-nano atrapado en una antena parabólica con rugosidad añadida, para caracterizar este sistema se propuso un modelo de partículas activas con inercia traslacional, pero con momento de inercia despreciable y con una torca intrínseca que le da un sentido de giro preferencial. Después de estudiar y analizar este sistema se procedió a proponer un modelo que generaliza tanto este sistema como otros reportados hasta el momento sobre materia activa inercial no interactuante, esto se hizo incorporando una velocidad de propulsión periódica a las partículas activas inerciales de estudio, las cuales no interactúan, se analizó el caso más general y a partir de este se hizo el cálculo para casos particulares. A continuación, se presentan las conclusiones a las que llegamos a partir de los resultados obtenidos, las conclusiones para cada sistema se presentan de forma separa ya que los dos tiene sus propias particularidades.

### 5.1. Robots hexbug-nano activos atrapados

Las secciones anteriores del capítulo 3 han demostrado que el modelo presentado es capaz de reproducir en buena medida la dinámica observada de los hexbugs-nano moviéndose en una antena parabólica con rugosidad añadida. Sin embargo, puede haber espacio para predecir mejor el SMS del sistema actual. Según la Fig. 3.4 (b), se puede apreciar una pequeña diferencia entre experimentos y teoría. Probablemente, un modelo más preciso que incluya la anisotropía de hexbugs-nano pueda reducir esta diferencia. Otros posibles factores que afectan las mediciones experimentales, como la reducción de energía de las baterías y las diferencias de fabricación entre los hexbugs, se descartan de acuerdo con la información que se muestra en la Fig. 3.9. En esa figura, se rastreó la energía cinética (velocidad) de tres bugs durante todo el proceso. Se puede ver que, en general, no hay una disminución marcada de energía a medida que realizamos más y más realizaciones a un bug dado. También observamos que durante el tiempo que un bug está en reposo, su batería puede incluso recuperar energía. De la misma figura, aunque el robot 1 comenzó con una velocidad más alta,

sus siguientes 5 realizaciones son similares en energía a los otros bugs. Los otros robots comenzaron con una energía cinética más baja, pero en las otras realizaciones mostraron una energía similar a la del robot 1. Por lo tanto, las diferencias en el diseño de fabricación y la descarga de las baterías no parecen tener ningún efecto sobre los resultados experimentales.

Debido a la semejanza de nuestro sistema con el reportado en [3], algunas similitudes y diferencias merecen discusión. En el sistema en curso, no se observó un estado ascendente (vector de orientación apuntando radialmente y condensación del sistema en el borde de la trampa). La razón es que la cantidad de energía entre nuestro experimento y el de [3] difiere drásticamente. Para probar esto, tomamos un video de material complementario de [3], que ejemplifica el caso de una transición en tiempo real de la órbita a la escalada. Luego rastreamos ese hexbug y dedujimos que su energía cinética es alrededor de  $K = 7.04 \times 10^{-6} J$ , mientras que su velocidad es alrededor de  $v = 0.037$  m/s. Por lo tanto, se espera una transición cuando las baterías de un bug están extremadamente bajas. En nuestro experimento, la energía de los bugs es un orden de magnitud mayor, a saber,  $K = 7 \times 10^{-5} J$ , mientras que nuestra velocidad es de alrededor de  $v = 0.13$  m/s. Esta diferencia de energía explica por qué no observamos un estado de escalada.

En el sistema actual, un estado orbital centrado en el origen (vector de orientación y velocidad casi paralelos, mientras que el sistema realiza trayectorias circulares centradas en el origen) no emergió exactamente. En cambio, se observaron trayectorias circulares deformadas no centradas en el origen y que cubrían la mayor parte de la parábola del plato (ver, por ejemplo, la Fig. 3.3 (b)). El estado circular se observa en [3], ya que no tienen rugosidad añadida en su parábola. Esto implica una difusividad rotacional baja y un coeficiente de fricción de traslación bajo. Cuando hay rugosidad, el bug aumenta su difusión rotatoria (debido a una superficie irregular) y luego muestra la parábola de manera más uniforme, lo que hace que el estado de órbita sea imposible. Para corroborar esta idea, realizamos otro experimento con una parábola sin la pintura adicional agregada (rugosidad), y dejamos que los bugs corrieran sobre ella. Como era de esperar, surgió el estado orbital.

El trabajo futuro consistiría en analizar un posible orden de largo alcance en un sistema de hexbugs interactuando. Usando un formalismo de Fokker-Planck, también sería interesante encontrar teóricamente las funciones de distribución radial y de velocidad para los hexbugs-nano.

## 5.2. Materia activa inercial con propulsión periódica

El modelo propuesto para partículas estocásticas activas inerciales nos brinda información acerca de la difusión de estas partículas con la obtención de MSD, cuyo cálculo se presentó en el capítulo 4. Algo que resaltar es el hecho de haber obtenido un MSD general que es válida para cualquier sistema que cumpla con las características de este modelo, es decir, que sean partículas estocásticas activas inerciales con una



velocidad de propulsión periódica en el tiempo, que estén sometidas a fuerzas y torcas externas debidas al medio las cuales se puedan modelar como ruido blanco y que no tengan interacción.

El primer cálculo que se realizó fue para el caso en que la partícula activa tiene una velocidad de propulsión sinusoidal, esto con el fin de saber el tipo de integrales que se obtienen y como resolverlas, ya que para el caso general las integrales a resolver son similares, pero con la incorporación de coeficientes de Fourier. La parte complicada de esta investigación fue calcular integrales estocásticas con correlaciones entre los vectores de orientación en el integrando, el procedimiento para calcular este tipo de integrales se puede ver en el Apéndice. El haber realizado primero el caso de velocidad de propulsión sinusoidal fue de gran ayuda para abordar el caso general ya que se tenía conocimiento previo del tipo de integrales que contribuyen a tiempos largos. Utilizando la observación anterior y realizando varios cálculos se obtuvo que el desplazamiento cuadrático medio (MSD) para el caso general está dado por (4.57). A partir de este resultado general podemos decir que la difusión de partículas activas inerciales sin interacción con cualquier velocidad de propulsión periódica es lineal en el tiempo, es decir, se tiene difusión normal. Otro aspecto importante es que con la expresión (4.57) solo se necesita calcular los coeficientes de Fourier para la velocidad de propulsión periódica que se desee estudiar, como muestra de su ventaja se calculó el MSD para tres casos particulares los cuales son cuando la velocidad de propulsión es una función coseno, una onda cuadrada y una función tipo zigzag. Aparte de calcular el MSD también se calculó el coeficiente de difusión efectiva para cada uno de los casos estudiados, los cuales son  $D_{Eg}$ ,  $D_{E0}$ ,  $D_{E1}$ ,  $D_{E2}$  y  $D_{E3}$ . Para finalizar con el capítulo 4 se hizo el análisis para el caso que se tiene una velocidad de propulsión recíproca o tipo coseno, este análisis nos llevó a concluir que entre más inercia tenga la partícula activa mayor será su difusión (ver Fig. 4.13). A partir de este último análisis se esperaría que las difusiones para partículas activas con cualquier velocidad de propulsión periódica fuesen menores al conseguido con una velocidad de propulsión constante de la misma magnitud, pero mayores a las de una partícula pasiva bajo las mismas condiciones, como sucede en el caso de la velocidad recíproca (ver Fig. 4.12).

Estos resultados son puramente teóricos y partiendo de ellos se pueden recuperar resultados ya conocidos de casos más simples, además se puede demostrar que el resultado que se obtuvo en el primer caso particular (4.64) es un caso derivado de lo obtenido en el cálculo del MSD para una partícula con velocidad de propulsión tipo sinusoidal general (4.49). También es posible recuperar lo reportado por Sandoval [34] que estudió el caso en el que se tiene velocidad de propulsión constante, y los resultados reportados de partículas brownianas activas libres.

Algunos trabajos futuros en este mismo tema pueden ser validar estos resultados con simulaciones a computadora y realizar un experimento que se ajuste al modelo matemático para ver si esta teoría es capaz de hacer buenas predicciones. Otra investigación que se tiene en mente es incorporar un tensor de fricción al sistema para estudiar el caso anisótropo, el cual puede tener mayor aplicación, aunque habrá que ver si es posible obtener un resultado analítico ya que los cálculos teóricos se complicarían aún más.

---

### 5.3. Artículo derivado de tesis

La investigación que se desarrolla en el Capítulo 3 del presente trabajo culminó en la publicación de un artículo en el “Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment” cuya referencia se presenta a continuación,

**Artículo:** C. Tapia-Ignacio, LL Gutierrez-Martinez, M. Sandoval, *Trapped active toy robots: theory and experiment*, Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2021 (5), 053404.

# Capítulo 6

## Apéndice

### Caso trampa fuerte de la teoría para hexbug-nano

En este trabajo se utilizaron los resultados del caso trampa débil ya que los valores que se obtienen del experimento se ubican en ese caso, pero puede ser útil para experimentos posteriores que se ocupen constantes restitativas más grandes, por lo que es conveniente tener soluciones para el caso  $S_L > 1/2$ , que se denomina caso de trampa fuerte". En esta situación, elevando al cuadrado la ec. (3.45) y su derivada ( $\mathbf{v} = d\mathbf{x}/dt$ ), y aplicando el promedio del conjunto se obtiene la forma integral del desplazamiento cuadrático medio

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} \cdot \mathbf{x} \rangle = & \frac{2U^2}{4S_L^2 - 1} \int_0^t \int_0^t \langle \mathbf{e}(t_1) \cdot \mathbf{e}(t_2) \rangle [\cos(\sigma t_1 - \sigma t_2) \\ & + (2 \sin^2(\sigma t) - 1) \cos(\sigma t_1 + \sigma t_2) \\ & - \sin(2\sigma t) \sin(\sigma t_1 + \sigma t_2)] e^{-\frac{1}{2\tau_M}(2t-t_1-t_2)} dt_2 dt_1 \end{aligned} \quad (6.1)$$

y la forma integral de la velocidad cuadrática media

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \rangle = & \frac{2U^2}{4S_L^2 - 1} \int_0^t \int_0^t \langle \mathbf{e}(t_1) \cdot \mathbf{e}(t_2) \rangle [\sigma^2 \cos(\sigma t_1 - \sigma t_2) \\ & + \sigma^2 (1 - 2 \sin^2(\sigma t)) \cos(\sigma t_1 + \sigma t_2) + \sigma^2 \sin(2\sigma t) \sin(\sigma t_1 + \sigma t_2) \\ & - \frac{\sigma}{\tau_M} \sin(2\sigma t) \cos(\sigma t_1 + \sigma t_2) + \frac{\sigma}{\tau_M} (\cos^2(\sigma t) - \sin^2(\sigma t)) \sin(\sigma t_1 + \sigma t_2) \\ & + \frac{1}{4\tau_M^2} \cos(\sigma t_1 - \sigma t_2) + \frac{1}{4\tau_M^2} (2 \sin^2(\sigma t) - 1) \cos(\sigma t_1 + \sigma t_2) \\ & - \frac{1}{4\tau_M^2} \sin(2\sigma t) \sin(\sigma t_1 + \sigma t_2)] e^{-\frac{1}{2\tau_M}(2t-t_1-t_2)} dt_2 dt_1 \end{aligned} \quad (6.2)$$

hay que recordar que  $\sigma = (1/2\tau_M)\sqrt{4S_L^2 - 1}$ . Se resuelven las integrales anteriores empleando la Ec. (3.51), se puede demostrar que para tiempos largos ( $t \rightarrow \infty$ ), el desplazamiento cuadrático medio del sistema,  $\langle \mathbf{x} \cdot \mathbf{x} \rangle$ , viene dado por

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} \cdot \mathbf{x} \rangle = & \frac{U^2}{4S_L^2 - 1} \left\{ \frac{\tau_M^2 (4S_L^2 - 1)}{S_L^2} \left[ \frac{1 + S_T + W_I}{g_{++}} + \frac{1 + S_T - W_I}{g_{+-}} \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{-1 + S_T + W_I}{g_{--}} + \frac{-1 + S_T - W_I}{g_{-+}} \right] \right. \\ & + 16\tau_M^2 \left[ \frac{-S_T^2 + S_L^2 + S_\omega^2 - W_{II}}{g_{--}g_{+-}} + \frac{-S_T^2 + S_L^2 + S_\omega^2 + W_{II}}{g_{-+}g_{++}} \right. \\ & \left. \left. + \frac{S_T^2 + S_L^2 - S_\omega^2 - \frac{1}{2}}{g_{-+}g_{+-}} + \frac{S_T^2 + S_L^2 - S_\omega^2 - \frac{1}{2}}{g_{--}g_{++}} \right] \right\} \end{aligned} \quad (6.3)$$

mientras que su velocidad cuadrática media,  $\langle \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \rangle$ , es

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \rangle = & \frac{U^2}{4S_L^2 - 1} \left\{ \frac{4S_L^2 - 1}{4S_L^2} \left[ \frac{4S_T S_L^2 - W_{III}}{g_{++}} + \frac{4S_T S_L^2 + W_{III}}{g_{+-}} \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{4S_T S_L^2 - W_{III}}{g_{--}} + \frac{4S_T S_L^2 + W_{III}}{g_{-+}} \right] \right. \\ & + 16S_L^2 \left[ \frac{-S_T^2 + S_L^2 + S_\omega^2 - W_{II}}{g_{--}g_{+-}} + \frac{-S_T^2 + S_L^2 + S_\omega^2 + W_{II}}{g_{-+}g_{++}} \right] \\ & \left. + \frac{J_-}{g_{-+}g_{+-}} + \frac{J_+}{g_{--}g_{++}} \right\} \end{aligned} \quad (6.4)$$

donde definimos

$$W_I = \frac{S_\omega}{\sqrt{4S_L^2 - 1}}$$

$$W_{II} = S_\omega \sqrt{4S_L^2 - 1}$$

$$W_{III} = S_\omega \left[ \sqrt{4S_L^2 - 1} + \frac{1}{\sqrt{4S_L^2 - 1}} \right]$$

$$g_{++} = (1 + 2S_T)^2 + \left( \sqrt{4S_L^2 - 1} + 2S_\omega \right)^2$$

$$g_{+-} = (1 + 2S_T)^2 + \left( \sqrt{4S_L^2 - 1} - 2S_\omega \right)^2$$

$$g_{--} = (1 - 2S_T)^2 + \left( \sqrt{4S_L^2 - 1} - 2S_\omega \right)^2$$

$$g_{-+} = (1 - 2S_T)^2 + \left( \sqrt{4S_L^2 - 1} + 2S_\omega \right)^2$$

$$J_- = -16S_L^4 + 4(4S_L^2 - 2)(S_\omega^2 - S_T^2) - 16S_T S_\omega \sqrt{4S_L^2 - 1}$$

$$J_+ = -16S_L^4 + 4(4S_L^2 - 2)(S_\omega^2 - S_T^2) + 16S_T S_\omega \sqrt{4S_L^2 - 1}$$

## Calculo de integral estocástica con $\langle e \cdot e \rangle$ en el integrando

En este apéndice se muestra la forma de resolver integrales estocásticas en cuyo integrando hay una correlación entre los vectores de orientación, para ello se desarrolla la solución de una de esas integrales.

$$\begin{aligned} \psi_7 &= \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{1}{\tau_M}(t-t_1)} \langle e_1(t_1) e_1(t_2) \rangle dt_2 dt_1 \\ &= e^{-\frac{t}{\tau_M}} \int_0^t \left[ \int_0^{t_1} e^{\frac{t_1}{\tau_M}} \langle e_1(t_1) e_1(t_2) \rangle dt_2 + \int_{t_1}^t e^{\frac{t_1}{\tau_M}} \langle e_1(t_2) e_1(t_1) \rangle dt_2 \right] dt_1 \\ &= \frac{e^{S_R - \frac{t}{\tau_M}}}{2} \int_0^t e^{\frac{t_1}{\tau_M}} \left[ \int_0^{t_1} e^{-\frac{S_R}{\tau_I}(t_1-t_2) - S_R e^{-\frac{1}{\tau_I}(t_1-t_2)}} dt_2 \right. \\ &\quad \left. + \int_{t_1}^t e^{-\frac{S_R}{\tau_I}(t_2-t_1) - S_R e^{-\frac{1}{\tau_I}(t_2-t_1)}} dt_2 \right] dt_1 \end{aligned}$$

Haciendo las siguientes definiciones

$$\psi_{7a} = \int_0^{t_1} e^{-\frac{S_R}{\tau_I}(t_1-t_2) - S_R e^{-\frac{1}{\tau_I}(t_1-t_2)}} dt_2$$

$$\psi_{7b} = \int_{t_1}^t e^{-\frac{S_R}{\tau_I}(t_2-t_1) - S_R e^{-\frac{1}{\tau_I}(t_2-t_1)}} dt_2$$

se tiene que

$$\psi_7 = \frac{e^{S_R - \frac{t}{\tau_M}}}{2} \int_0^t e^{\frac{t_1}{\tau_M}} [\psi_{7a} + \psi_{7b}] dt_1$$

la primera integral que hay que resolver es

$$\psi_{7a} = \int_0^{t_1} e^{-\frac{S_R}{\tau_I}(t_1-t_2) - S_R e^{-\frac{1}{\tau_I}(t_1-t_2)}} dt_2$$

cuya solución es

$$\psi_{7a} = \frac{\tau_I}{S_R} \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R-1} \Gamma(S_R, z_0(t_1), S_R) \quad (6.5)$$

la segunda integral también tiene una solución similar

$$\psi_{7b} = \int_{t_1}^t e^{-\frac{S_R}{\tau_I}(t_2-t_1) - S_R e^{-\frac{1}{\tau_I}(t_2-t_1)}} dt_2$$

y es la siguiente

$$\psi_{7b} = \frac{\tau_I}{S_R} \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R-1} \Gamma(S_R, z_0(t-t_1), S_R) \quad (6.6)$$

sustituyendo lo obtenido (6.5) y (6.6) en  $\psi_7$

$$\begin{aligned} \psi_7 = & \frac{e^{S_R - \frac{t}{\tau_M}} \tau_I}{2S_R} \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R-1} \left[ \int_0^t e^{\frac{t_1}{\tau_M}} \Gamma(S_R, z_0(t_1), S_R) dt_1 \right. \\ & \left. + \int_0^t e^{\frac{t_1}{\tau_M}} \Gamma(S_R, z_0(t-t_1), S_R) dt_1 \right] \end{aligned}$$

Las integrales a resolver en esta parte del cálculo son

$$\psi_{7a}^* = \int_0^t e^{\frac{t_1}{\tau_M}} \Gamma(S_R, z_0(t_1), S_R) dt_1$$

$$\psi_{7b}^* = \int_0^t e^{\frac{t_1}{\tau_M}} \Gamma(S_R, z_0(t_1), S_R) dt_1$$

la solución para la primera es

$$\psi_{7a}^* = \left[ \Gamma(S_R, z_0(t_1), S_R) \tau_M e^{\frac{t_1}{\tau_M}} \right] \Big|_0^t - E_5$$

donde

$$E_5 = \tau_M (S_R)^{S_R-1} \left( \frac{1}{S_R} \right)^{k_5-1} \Gamma(k_5, z_0(t), S_R)$$

con  $k_5 = S_R - \frac{\tau_I}{\tau_M} = S_R - \frac{S_R}{S_T}$ . La segunda integral tiene como solución

$$\psi_{7b}^* = e^{\frac{t}{\tau_M}} \left[ -\Gamma(S_R, z_0(\chi), S_R) \tau_M e^{-\frac{\chi}{\tau_M}} \right] \Big|_0^t + e^{\frac{t}{\tau_M}} E_6$$

y se tiene que

$$E_6 = \tau_M (S_R)^{S_R-1} \left( \frac{1}{S_R} \right)^{k_6-1} \Gamma(k_6, z_0(t), S_R)$$

en donde queda definido  $k_6 = \frac{\tau_I}{\tau_M} + S_R = \frac{S_R}{S_T} + S_R$ . Al reemplazar estos resultados en  $\psi_7$

$$\begin{aligned}\psi_7 &= \frac{e^{S_R - \frac{t}{\tau_M} \tau_I}}{2S_R} \left(\frac{1}{S_R}\right)^{S_R-1} [\psi_{7a}^* + \psi_{7b}^*] \\ &= \frac{e^{S_R - \frac{t}{\tau_M} \tau_I}}{2S_R} \left(\frac{1}{S_R}\right)^{S_R-1} \left( \left[ \Gamma(S_R, z_0(t_1), S_R) \tau_M e^{\frac{t_1}{\tau_M}} \right] \Big|_0^t - E_5 \right. \\ &\quad \left. + e^{\frac{t}{\tau_M}} \left[ -\Gamma(S_R, z_0(\chi), S_R) \tau_M e^{-\frac{\chi}{\tau_M}} \right] \Big|_0^t + e^{\frac{t}{\tau_M}} E_6 \right)\end{aligned}$$

evaluando los límites

$$\begin{aligned}\psi_7 &= \frac{e^{S_R \tau_I}}{2S_R} \left(\frac{1}{S_R}\right)^{S_R-1} \left[ \tau_M \Gamma(S_R, z_0(t), S_R) - e^{-\frac{t}{\tau_M}} E_5 \right. \\ &\quad \left. - \tau_M e^{-\frac{t}{\tau_M}} \Gamma(S_R, z_0(t), S_R) + E_6 \right] \\ &= \frac{e^{S_R \tau_I \tau_M}}{2S_R} \left[ \left(\frac{1}{S_R}\right)^{S_R-1} \Gamma(S_R, z_0(t), S_R) - e^{-\frac{t}{\tau_M}} \left(\frac{1}{S_R}\right)^{k_5-1} \Gamma(k_5, z_0(t), S_R) \right. \\ &\quad \left. - e^{-\frac{t}{\tau_M}} \left(\frac{1}{S_R}\right)^{S_R-1} \Gamma(S_R, z_0(t), S_R) + \left(\frac{1}{S_R}\right)^{k_6-1} \Gamma(k_6, z_0(t), S_R) \right]\end{aligned}$$

haciendo el límite  $t \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned}\psi_7 &\cong \frac{e^{S_R \tau_I \tau_M}}{2S_R} \left[ \left(\frac{1}{S_R}\right)^{S_R-1} \Gamma(S_R, 0, S_R) \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{1}{S_R}\right)^{\frac{S_R}{S_T} + S_R - 1} \Gamma\left(\frac{S_R}{S_T} + S_R, 0, S_R\right) \right] \quad (6.7)\end{aligned}$$

## Parte real del MSD para caso periódico general

Ahora calculamos la parte real de  $A_n$  que nos permitirá obtener los datos numéricos y para ello es necesario tener en cuenta las siguientes propiedades de los números complejos.

$$\operatorname{Re}[z_a z_b] = \operatorname{Re}[z_a] \operatorname{Re}[z_b] - \operatorname{Im}[z_a] \operatorname{Im}[z_b]$$

$$\operatorname{Im}[z_a z_b] = \operatorname{Re}[z_a] \operatorname{Im}[z_b] + \operatorname{Im}[z_a] \operatorname{Re}[z_b]$$

donde  $z_a = x_a + iy_a$  y  $z_b = x_b + iy_b$ . En nuestro caso

$$z_a = \left(\frac{1}{S_R}\right)^{S_R + in\omega\tau_I - 1}$$

$$z_b = \Gamma(S_R + in\omega\tau_I, 0, S_R)$$

por lo que

$$\begin{aligned} \Re[A_n] &= \Re \left[ \left(\frac{1}{S_R}\right)^{S_R + in\omega\tau_I - 1} \Gamma(S_R + in\omega\tau_I, 0, S_R) \right] \\ &= \Re \left[ \left(\frac{1}{S_R}\right)^{S_R + in\omega\tau_I - 1} \right] \Re[\Gamma(S_R + in\omega\tau_I, 0, S_R)] \\ &\quad - \Im \left[ \left(\frac{1}{S_R}\right)^{S_R + in\omega\tau_I - 1} \right] \Im[\Gamma(S_R + in\omega\tau_I, 0, S_R)] \end{aligned}$$

calculamos cada término por separado

$$\begin{aligned} \Re \left[ \left(\frac{1}{S_R}\right)^{S_R + in\omega\tau_I - 1} \right] &= \left(\frac{1}{S_R}\right)^{S_R - 1} \Re \left[ \left(\frac{1}{S_R}\right)^{in\omega\tau_I} \right] \\ &= \left(\frac{1}{S_R}\right)^{S_R - 1} \Re \left[ e^{in\omega\tau_I \ln\left(\frac{1}{S_R}\right)} \right] \\ &= \left(\frac{1}{S_R}\right)^{S_R - 1} \cos \left[ n\omega\tau_I \ln \left(\frac{1}{S_R}\right) \right] \end{aligned}$$

el cálculo de la parte imaginaria es similar

$$\begin{aligned} \Im \left[ \left(\frac{1}{S_R}\right)^{S_R + in\omega\tau_I - 1} \right] &= \left(\frac{1}{S_R}\right)^{S_R - 1} \Im \left[ \left(\frac{1}{S_R}\right)^{in\omega\tau_I} \right] \\ &= \left(\frac{1}{S_R}\right)^{S_R - 1} \Im \left[ e^{in\omega\tau_I \ln\left(\frac{1}{S_R}\right)} \right] \\ &= \left(\frac{1}{S_R}\right)^{S_R - 1} \sin \left[ n\omega\tau_I \ln \left(\frac{1}{S_R}\right) \right] \end{aligned}$$

para obtener la parte real e imaginaria de la función gamma se necesita utilizar las siguientes propiedades

$$\Re[\Gamma(z, 0, z_1)] = \frac{\Gamma(z, 0, z_1) + \Gamma(\bar{z}, 0, z_1)}{2}$$

$$\Im[\Gamma(z, 0, z_1)] = \frac{\Gamma(z, 0, z_1) - \Gamma(\bar{z}, 0, z_1)}{2i}$$



donde  $z$  es un número imaginario de la forma  $z = x + iy$  y  $\bar{z}$  es su complejo conjugado. Aplicando lo anterior se obtiene lo siguiente

$$\begin{aligned}
\Re [\Gamma (S_R + in\omega\tau_I, 0, S_R)] &= \int_0^{S_R} e^{-q} \left( \frac{q^{S_R+in\omega\tau_I-1} + q^{S_R-in\omega\tau_I-1}}{2} \right) dq \\
&= \int_0^{S_R} e^{-q} q^{S_R-1} \left( \frac{q^{in\omega\tau_I} + q^{-in\omega\tau_I}}{2} \right) dq \\
&= \int_0^{S_R} e^{-q} q^{S_R-1} \left( \frac{e^{in\omega\tau_I \ln q} + e^{-in\omega\tau_I \ln q}}{2} \right) dq \\
&= \int_0^{S_R} e^{-q} q^{S_R-1} \cos (n\omega\tau_I \ln q) dq
\end{aligned}$$

mientras que la parte imaginaria es

$$\begin{aligned}
\Im [\Gamma (S_R + in\omega\tau_I, 0, S_R)] &= \int_0^{S_R} e^{-q} \left( \frac{q^{S_R+in\omega\tau_I-1} - q^{S_R-in\omega\tau_I-1}}{2i} \right) dq \\
&= \int_0^{S_R} e^{-q} q^{S_R-1} \left( \frac{q^{in\omega\tau_I} - q^{-in\omega\tau_I}}{2i} \right) dq \\
&= \int_0^{S_R} e^{-q} q^{S_R-1} \left( \frac{e^{in\omega\tau_I \ln q} - e^{-in\omega\tau_I \ln q}}{2i} \right) dq \\
&= \int_0^{S_R} e^{-q} q^{S_R-1} \sin (n\omega\tau_I \ln q) dq
\end{aligned}$$

por lo que

$$\begin{aligned}
\Re [A_n] &= \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R-1} \cos \left[ n\omega\tau_I \ln \left( \frac{1}{S_R} \right) \right] \Re [\Gamma (S_R + in\omega\tau_I, 0, S_R)] \\
&\quad - \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R-1} \sin \left[ n\omega\tau_I \ln \left( \frac{1}{S_R} \right) \right] \Im [\Gamma (S_R + in\omega\tau_I, 0, S_R)]
\end{aligned}$$

donde

$$\Re [\Gamma (S_R + in\omega\tau_I, 0, S_R)] = \int_0^{S_R} e^{-q} q^{S_R-1} \cos (n\omega\tau_I \ln q) dq \quad (6.8)$$

$$\Im [\Gamma (S_R + in\omega\tau_I, 0, S_R)] = \int_0^{S_R} e^{-q} q^{S_R-1} \sin (n\omega\tau_I \ln q) dq \quad (6.9)$$

Se hacen las siguientes definiciones para escribir el MSD en términos de cantidades reales

$$C_n = \cos \left[ n\omega\tau_I \ln \left( \frac{1}{S_R} \right) \right] \quad (6.10)$$

$$S_n = \sin \left[ n\omega\tau_I \ln \left( \frac{1}{S_R} \right) \right] \quad (6.11)$$

$$R_n = \Re [\Gamma (S_R + in\omega\tau_I, 0, S_R)] \quad (6.12)$$

$$I_n = \Im [\Gamma (S_R + in\omega\tau_I, 0, S_R)] \quad (6.13)$$

con esto se reduce el tamaño de  $\Re [A_n]$  como se muestra a continuación.

$$\Re [A_n] = \left( \frac{1}{S_R} \right)^{S_R-1} [C_n R_n - S_n I_n]$$

## Calculo de coeficientes de Fourier

- Para la función  $\cos(\omega t)$

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{2}{T} \int_0^T \cos \omega t dt = \frac{2}{T} \int_0^T \cos \left( \frac{2\pi}{T} t \right) dt \\ &= \frac{1}{\pi} \sin \left( \frac{2\pi}{T} t \right) \Big|_0^T = 0 \\ a_n &= \frac{2}{T} \int_0^T \cos \left( \frac{2\pi}{T} t \right) \cos \left( \frac{2\pi n}{T} t \right) dt \\ &= \frac{1}{T} \int_0^T \left[ \cos \left( \frac{2\pi}{T} t [1+n] \right) + \cos \left( \frac{2\pi}{T} t [1-n] \right) \right] dt \\ &= \frac{1}{T} \left[ \frac{T}{2\pi(1+n)} \sin \left( \frac{2\pi}{T} t [1+n] \right) \Big|_0^T + \frac{T}{2\pi(1-n)} \sin \left( \frac{2\pi}{T} t [1-n] \right) \Big|_0^T \right] \\ &= \frac{1}{T} \left[ \frac{T}{2\pi(1+n)} \sin (2\pi [1+n]) + \frac{T}{2\pi(1-n)} \sin (2\pi [1-n]) \right] \\ &= 0 \end{aligned}$$

Pero para  $n = 1$  se tiene un caso particular de  $a_n$  ya que

$$a_1 = \frac{2}{T} \int_0^T \cos^2 \left( \frac{2\pi}{T} t \right) dt = \frac{1}{T} \int_0^T \left[ 1 + \cos \left( \frac{4\pi}{T} t \right) \right] dt$$

$$= \frac{1}{T} \left[ t \Big|_0^T + \frac{T}{4\pi} \sin \left( \frac{4\pi}{T} t \right) \Big|_0^T \right] = 1$$

mientras que

$$\begin{aligned} b_n &= \frac{2}{T} \int_0^T \cos \left( \frac{2\pi}{T} t \right) \sin \left( \frac{2\pi n}{T} t \right) dt \\ &= \frac{1}{T} \int_0^T \left[ \sin \left( \frac{2\pi}{T} t [1+n] \right) - \sin \left( \frac{2\pi}{T} t [1-n] \right) \right] dt \\ &= \frac{1}{T} \left[ -\frac{T}{2\pi [1+n]} \cos \left( \frac{2\pi}{T} t [1+n] \right) \Big|_0^T + \frac{T}{2\pi [1-n]} \cos \left( \frac{2\pi}{T} t [1-n] \right) \Big|_0^T \right] \\ &= -\frac{1}{2\pi [1+n]} [\cos (2\pi [1+n]) - 1] + \frac{1}{2\pi [1-n]} [\cos (2\pi [1-n]) - 1] \\ &= 0 \end{aligned}$$

Se obtuvo que los coeficientes para la función  $\cos(\omega t)$  son  $a_0 = 0$ ,  $b_n = 0$  y  $a_1 = 1$  mientras que los demás  $a_n = 0$ .

■ **Para la función  $\xi_N$**

$$\xi_N(t) \cong \begin{cases} 1 & \text{para } mT < t \leq (m + \frac{1}{2})T \\ 0 & \text{para } (m + \frac{1}{2})T < t \leq (m+1)T \end{cases} \quad \text{con } m = 0, 1, 2, \dots,$$

Calculamos los coeficientes correspondientes

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{2}{T} \int_0^T \xi_N(t) dt = \frac{2}{T} \left( \frac{1}{\mathfrak{M}+1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ \int_{mT}^{(m+\frac{1}{2})T} dt + \int_{(m+\frac{1}{2})T}^{(m+1)T} 0 dt \right] \\ &= \frac{2}{T} \left( \frac{1}{\mathfrak{M}+1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \int_{mT}^{(m+\frac{1}{2})T} dt = \frac{2}{T} \left( \frac{1}{\mathfrak{M}+1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} t \Big|_{mT}^{(m+\frac{1}{2})T} \\ &= \frac{2}{T} \left( \frac{1}{\mathfrak{M}+1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ \left( m + \frac{1}{2} \right) T - mT \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= 2 \left( \frac{1}{\mathfrak{M} + 1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ m + \frac{1}{2} - m \right] = \left( \frac{1}{\mathfrak{M} + 1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} 1 \\
&= \left( \frac{1}{\mathfrak{M} + 1} \right) (\mathfrak{M} + 1) \\
&= 1
\end{aligned}$$

se sigue con el cálculo de  $a_n$

$$\begin{aligned}
a_n &= \frac{2}{T} \int_0^T \xi_N(t) \cos \left( \frac{2\pi n}{T} t \right) dt \\
&= \frac{2}{T} \left( \frac{1}{\mathfrak{M} + 1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ \int_{mT}^{(m+\frac{1}{2})T} \cos \left( \frac{2\pi n}{T} t \right) dt + 0 \right] \\
&= \frac{2}{T} \left( \frac{1}{\mathfrak{M} + 1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ \frac{T}{2\pi n} \sin \left( \frac{2\pi n}{T} t \right) \right] \Big|_{mT}^{(m+\frac{1}{2})T} \\
&= \frac{1}{n\pi} \left( \frac{1}{\mathfrak{M} + 1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ \sin \left( 2\pi n \left( m + \frac{1}{2} \right) \right) - \sin (2\pi n m) \right]
\end{aligned}$$

como  $m = 0, 1, 2, \dots$ , los números  $m + \frac{1}{2}$  son múltiplos enteros de  $\frac{1}{2}$  lo que significa que

$$2\pi n \left( m + \frac{1}{2} \right) \quad \text{son múltiplos enteros de } \pi$$

mientras que

$$2\pi n (m + 1) \quad \text{son múltiplos enteros de } 2\pi$$

por lo que

$$\begin{aligned}
a_n &= \frac{1}{n\pi} \left( \frac{1}{\mathfrak{M} + 1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ \sin \left( 2\pi n \left( m + \frac{1}{2} \right) \right) - \sin (2\pi n m) \right] \\
&= 0
\end{aligned}$$

Ahora se continua con el cálculo de  $b_n$

$$b_n = \frac{2}{T} \int_0^T \xi_N(t) \sin \left( \frac{2\pi n}{T} t \right) dt$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{2}{T} \left( \frac{1}{\mathfrak{M} + 1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ \int_{mT}^{(m+\frac{1}{2})T} \sin \left( \frac{2\pi n}{T} t \right) dt + 0 \right] \\
&= \frac{2}{T} \left( \frac{1}{\mathfrak{M} + 1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ -\frac{T}{2\pi n} \cos \left( \frac{2\pi n}{T} t \right) \right] \Big|_{mT}^{(m+\frac{1}{2})T} \\
&= \frac{1}{n\pi} \left( \frac{1}{\mathfrak{M} + 1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ -\cos \left( 2\pi n \left( m + \frac{1}{2} \right) \right) + \cos (2\pi n m) \right] \\
&= \frac{1}{n\pi} \left( \frac{1}{\mathfrak{M} + 1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ 1 - (-1)^{2n(m+\frac{1}{2})} \right]
\end{aligned}$$

en donde  $\mathfrak{M}$  es un número entero que depende del valor del tiempo ya que se tiene que cumplir que  $t$  siempre caiga en un intervalo con  $\mathfrak{M}T < t \leq (\mathfrak{M} + 1)T$ , entonces entre más aumente el tiempo mayor será el valor de  $\mathfrak{M}$ . Resumiendo lo obtenido se tiene que los coeficientes de Fourier para la onda cuadrada son

$$a_0 = 1 \quad ; \quad a_n = 0 \quad ; \quad b_n = \frac{1}{n\pi} \left( \frac{1}{\mathfrak{M}+1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ 1 - (-1)^{2n(m+\frac{1}{2})} \right]$$

■ **Para la función  $\xi_N$**

$$\xi_N(t) \cong \begin{cases} t - mT & \text{para } mT < t \leq (m + \frac{1}{2})T \\ (m + 1)T - t & \text{para } (m + \frac{1}{2})T < t \leq (m + 1)T \end{cases} \quad \text{con } m = 0, 1, 2, \dots,$$

de igual manera se calculan los coeficientes correspondientes

$$\begin{aligned}
a_0 &= \frac{2}{T} \int_0^T \xi_N(t) dt \\
&= \frac{2}{T} \left( \frac{1}{\mathfrak{M} + 1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ \int_{mT}^{(m+\frac{1}{2})T} (t - mT) dt + \int_{(m+\frac{1}{2})T}^{(m+1)T} ([m + 1]T - t) dt \right] \\
&= \frac{2}{T} \left( \frac{1}{\mathfrak{M} + 1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ \frac{t^2}{2} \Big|_{mT}^{(m+\frac{1}{2})T} - mTt \Big|_{mT}^{(m+\frac{1}{2})T} \right. \\
&\quad \left. + [m + 1]Tt \Big|_{(m+\frac{1}{2})T}^{(m+1)T} - \frac{t^2}{2} \Big|_{(m+\frac{1}{2})T}^{(m+1)T} \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{2}{T} \left( \frac{1}{\mathfrak{M}+1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ \frac{1}{2} \left( \left( m + \frac{1}{2} \right)^2 T^2 - m^2 T^2 \right) - mT \left( \left( m + \frac{1}{2} \right) T - mT \right) \right. \\
&+ [m+1]T \left( (m+1)T - \left( m + \frac{1}{2} \right) T \right) - \frac{1}{2} \left( (m+1)^2 T^2 - \left( m + \frac{1}{2} \right)^2 T^2 \right) \left. \right] \\
&= \frac{2}{T} \left( \frac{1}{\mathfrak{M}+1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ \frac{1}{2} \left( 2 \left( m + \frac{1}{2} \right)^2 T^2 - m^2 T^2 - (m+1)^2 T^2 \right) \right. \\
&\quad \left. - mT^2 \left( m + \frac{1}{2} \right) + m^2 T^2 + (m+1)^2 T^2 - (m+1) \left( m + \frac{1}{2} \right) T^2 \right] \\
&= 2T \left( \frac{1}{\mathfrak{M}+1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ \frac{1}{2} \left( 2 \left( m + \frac{1}{2} \right)^2 - m^2 - (m+1)^2 \right) - m^2 - \frac{m}{2} + m^2 \right. \\
&\quad \left. + m^2 + 2m + 1 - m^2 - \frac{3}{2}m - \frac{1}{2} \right] \\
&= 2T \left( \frac{1}{\mathfrak{M}+1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ m^2 + m + \frac{1}{4} - m^2 - m - \frac{1}{2} - m^2 - \frac{m}{2} + m^2 \right. \\
&\quad \left. + m^2 + 2m + 1 - m^2 - \frac{3}{2}m - \frac{1}{2} \right] \\
&= 2T \left( \frac{1}{\mathfrak{M}+1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \frac{1}{4} = \frac{T}{2} \left( \frac{1}{\mathfrak{M}+1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} 1 \\
&= \frac{T}{2} \left( \frac{1}{\mathfrak{M}+1} \right) (\mathfrak{M}+1) \\
&= \frac{T}{2}
\end{aligned}$$

Lo siguiente es calcular  $a_n$

$$\begin{aligned}
a_n &= \frac{2}{T} \int_0^T \xi_N(t) \cos \left( \frac{2\pi n}{T} t \right) dt \\
&= \frac{2}{T} \left( \frac{1}{\mathfrak{M}+1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ \int_{mT}^{(m+\frac{1}{2})T} (t - mT) \cos \left( \frac{2\pi n}{T} t \right) dt \right.
\end{aligned}$$


---

$$\begin{aligned}
& + \int_{(m+\frac{1}{2})T}^{(m+1)T} ([m+1]T - t) \cos\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) dt \Big] \\
= & \frac{2}{T} \left(\frac{1}{\mathfrak{M}+1}\right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ -mT \int_{mT}^{(m+\frac{1}{2})T} \cos\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) dt + [m+1]T \int_{(m+\frac{1}{2})T}^{(m+1)T} \cos\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) dt \right. \\
& \left. + \int_{mT}^{(m+\frac{1}{2})T} t \cos\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) dt - \int_{(m+\frac{1}{2})T}^{(m+1)T} t \cos\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) dt \right] \\
= & \frac{2}{T} \left(\frac{1}{\mathfrak{M}+1}\right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ -mT \left(\frac{T}{2\pi n}\right) \sin\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) \Big|_{mT}^{(m+1/2)T} \right. \\
& \left. + [m+1]T \left(\frac{T}{2\pi n}\right) \sin\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) \Big|_{(m+1/2)T}^{(m+1)T} \right. \\
& \left. + \left(\frac{T}{2\pi n}\right) t \sin\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) \Big|_{mT}^{(m+1/2)T} - \left(\frac{T}{2\pi n}\right) \int_{mT}^{(m+\frac{1}{2})T} \sin\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) dt \right. \\
& \left. - \left(\frac{T}{2\pi n}\right) t \sin\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) \Big|_{(m+1/2)T}^{(m+1)T} + \left(\frac{T}{2\pi n}\right) \int_{(m+\frac{1}{2})T}^{(m+1)T} \sin\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) dt \right] \\
= & \frac{1}{\pi n} \left(\frac{1}{\mathfrak{M}+1}\right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ -mT \left( \sin\left[2\pi n\left(m+\frac{1}{2}\right)\right] - \sin[2\pi nm] \right) \right. \\
& \left. + [m+1]T \left( \sin[2\pi n(m+1)] - \sin\left[2\pi n\left(m+\frac{1}{2}\right)\right] \right) \right. \\
& \left. + \left( \left[m+\frac{1}{2}\right]T \sin\left[2\pi n\left(m+\frac{1}{2}\right)\right] - mT \sin[2\pi nm] \right) \right. \\
& \left. - \left( [m+1]T \sin[2\pi n(m+1)] - \left[m+\frac{1}{2}\right]T \sin\left[2\pi n\left(m+\frac{1}{2}\right)\right] \right) \right. \\
& \left. + \left(\frac{T}{2\pi n}\right) \cos\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) \Big|_{mT}^{(m+1/2)T} - \left(\frac{T}{2\pi n}\right) \cos\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) \Big|_{(m+1/2)T}^{(m+1)T} \right]
\end{aligned}$$

como se hizo la observación anteriormente  $2\pi n \left(m + \frac{1}{2}\right)$  son números múltiplos enteros de  $\pi$ ,  $2\pi n(m+1)$  y  $2\pi nm$  son múltiplos enteros de  $2\pi$ , por lo que solo sobreviven los cosenos

$$\begin{aligned}
 a_n &= \frac{T}{2(\pi n)^2} \left(\frac{1}{\mathfrak{M}+1}\right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ \cos\left(2\pi n \left(m + \frac{1}{2}\right)\right) - \cos(2\pi nm) \right. \\
 &\quad \left. - \cos(2\pi n(m+1)) + \cos\left(2\pi n \left(m + \frac{1}{2}\right)\right) \right] \\
 &= \frac{T}{2(\pi n)^2} \left(\frac{1}{\mathfrak{M}+1}\right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ 2 \cos\left(2\pi n \left(m + \frac{1}{2}\right)\right) \right. \\
 &\quad \left. - \cos(2\pi nm) - \cos(2\pi n(m+1)) \right] \\
 &= \frac{T}{(\pi n)^2} \left(\frac{1}{\mathfrak{M}+1}\right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ (-1)^{2n(m+\frac{1}{2})} - 1 \right]
 \end{aligned}$$

por último, se hace el cálculo para encontrar los  $b_n$

$$\begin{aligned}
 b_n &= \frac{2}{T} \int_0^T \xi_N(t) \sin\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) dt \\
 &= \frac{2}{T} \left(\frac{1}{\mathfrak{M}+1}\right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ \int_{mT}^{(m+\frac{1}{2})T} (t - mT) \sin\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) dt \right. \\
 &\quad \left. + \int_{(m+\frac{1}{2})T}^{(m+1)T} ([m+1]T - t) \sin\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) dt \right] \\
 &= \frac{2}{T} \left(\frac{1}{\mathfrak{M}+1}\right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ -mT \int_{mT}^{(m+\frac{1}{2})T} \sin\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) dt + [m+1]T \int_{(m+\frac{1}{2})T}^{(m+1)T} \sin\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) dt \right. \\
 &\quad \left. + \int_{mT}^{(m+\frac{1}{2})T} t \sin\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) dt - \int_{(m+\frac{1}{2})T}^{(m+1)T} t \sin\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) dt \right] \\
 &= \frac{2}{T} \left(\frac{1}{\mathfrak{M}+1}\right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ mT \left(\frac{T}{2\pi n}\right) \cos\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) \Big|_{mT}^{(m+\frac{1}{2})T} \right.
 \end{aligned}$$


---



$$\begin{aligned}
& - [m + 1] T \left( \frac{T}{2\pi n} \right) \cos \left( \frac{2\pi n}{T} t \right) \Big|_{(m+1/2)T}^{(m+1)T} \\
& - \left( \frac{T}{2\pi n} \right) t \cos \left( \frac{2\pi n}{T} t \right) \Big|_{mT}^{(m+1/2)T} + \left( \frac{T}{2\pi n} \right) \int_{mT}^{(m+1/2)T} \cos \left( \frac{2\pi n}{T} t \right) dt \\
& + \left( \frac{T}{2\pi n} \right) t \cos \left( \frac{2\pi n}{T} t \right) \Big|_{(m+1/2)T}^{(m+1)T} - \left( \frac{T}{2\pi n} \right) \int_{(m+1/2)T}^{(m+1)T} \cos \left( \frac{2\pi n}{T} t \right) dt \Big] \\
& = \frac{1}{\pi n} \left( \frac{1}{\mathfrak{M} + 1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ mT \left( \cos \left[ 2\pi n \left( m + \frac{1}{2} \right) \right] - \cos [2\pi n m] \right) \right. \\
& \quad - [m + 1] T \left( \cos [2\pi n (m + 1)] - \cos \left[ 2\pi n \left( m + \frac{1}{2} \right) \right] \right) \\
& \quad - \left( \left[ m + \frac{1}{2} \right] T \cos \left[ 2\pi n \left( m + \frac{1}{2} \right) \right] - mT \cos [2\pi n m] \right) \\
& \quad + \left( [m + 1] T \cos [2\pi n (m + 1)] - \left[ m + \frac{1}{2} \right] T \cos \left[ 2\pi n \left( m + \frac{1}{2} \right) \right] \right) \\
& \quad \left. + \left( \frac{T}{2\pi n} \right) \sin \left( \frac{2\pi n}{T} t \right) \Big|_{mT}^{(m+1/2)T} - \left( \frac{T}{2\pi n} \right) \sin \left( \frac{2\pi n}{T} t \right) \Big|_{(m+1/2)T}^{(m+1)T} \right] \\
& = \frac{T}{\pi n} \left( \frac{1}{\mathfrak{M} + 1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ m (-1)^{2n(m+1/2)} - m - (m + 1) + (m + 1) (-1)^{2n(m+1/2)} \right. \\
& \quad \left. - \left( m + \frac{1}{2} \right) (-1)^{2n(m+1/2)} + m + (m + 1) - \left( m + \frac{1}{2} \right) (-1)^{2n(m+1/2)} \right] \\
& = \frac{T}{\pi n} \left( \frac{1}{\mathfrak{M} + 1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ (-1)^{2n(m+1/2)} \left( 2m + 1 - 2 \left[ m + \frac{1}{2} \right] \right) \right] \\
& = 0
\end{aligned}$$

En forma de resumen colocamos los resultados que se encontraron para los coeficientes que corresponden a este caso

$$a_0 = \frac{T}{2} \quad ; \quad a_n = \frac{T}{(\pi n)^2} \left( \frac{1}{\mathfrak{M} + 1} \right) \sum_{m=0}^{\mathfrak{M}} \left[ (-1)^{2n(m+1/2)} - 1 \right] \quad ; \quad b_n = 0$$



# Bibliografía

- [1] T. Vicsek and A. Zafeiris, “Collective motion,” *Physics Reports*, vol. 517, no. 3, pp. 71–140, 2012. Collective motion.
- [2] Micro-Robotic-Creatures, “Hexbug-nano.” <https://www.hexbug.com>. Accedido 11/05/2021.
- [3] O. Dauchot and V. Démery, “Dynamics of a self-propelled particle in a harmonic trap,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 122, p. 068002, Feb 2019.
- [4] C. Scholz, S. Jahanshahi, A. Ldov, and H. Löwen, “Inertial delay of self-propelled particles,” *Nature Communications*, vol. 9, p. 5156, 12 2018.
- [5] S. Blundell and K. Blundell, *Concepts in Thermal Physics*. Comprehensive Assessment of Water Management in Agriculture, Oxford University Press, 2006.
- [6] B. P. C, *Física estadística. Volumen 5*. Volumen, Reverte, 2020.
- [7] L. Landau and E. Lifshitz, *Física teórica. Física estadística*. Curso de Física Teórica, Editorial Reverte, 1969.
- [8] W. Coffey, Y. Kalmykov, and J. Waldron, *The Langevin Equation: With Applications to Stochastic Problems in Physics, Chemistry, and Electrical Engineering*. Series in contemporary chemical physics, World Scientific, 2004.
- [9] P. Mörters and Y. Peres, *Brownian Motion*. Cambridge Series in Statistical and Probabilistic Mathematics, Cambridge University Press, 2010.
- [10] H. Risken, *The Fokker-Planck Equation: Methods of Solution and Applications*. Springer Series in Synergetics, Springer Berlin Heidelberg, 2012.
- [11] J. Dhont, *An Introduction to Dynamics of Colloids*. ISSN, Elsevier Science, 1996.
- [12] N. Pottier, *Nonequilibrium Statistical Physics: Linear Irreversible Processes*. Oxford Graduate Texts, OUP Oxford, 2010.
- [13] P. Debye, *Polar Molecules*. Dover books explaining science and mathematics, Dover Publications, 1929.

- 
- [14] F. Schweitzer and J. Farmer, *Brownian Agents and Active Particles: Collective Dynamics in the Natural and Social Sciences*. Springer Series in Synergetics, Springer, 2007.
- [15] M. C. Marchetti, J. F. Joanny, S. Ramaswamy, T. B. Liverpool, J. Prost, M. Rao, and R. A. Simha, “Hydrodynamics of soft active matter,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 85, pp. 1143–1189, Jul 2013.
- [16] G. Gompper, R. Winkler, T. Speck, A. Solon, C. Nardini, F. Peruani, H. Löwen, R. Golestanian, U. Kaupp, L. Alvarez, T. Kjørboe, E. Lauga, W. Poon, A. Desimone, S. Muiños-Landin, A. Fischer, N. Söker, F. Cichos, R. Kapral, and S. Kale, “The 2020 motile active matter roadmap,” *Journal of physics: condensed matter*, vol. 32, pp. 193001:1–193001:67, May 2020.
- [17] M. Sandoval, R. Velasco, and J. Jiménez-Aquino, “Magnetic field effect on charged brownian swimmers,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 442, pp. 321–328, 2016.
- [18] T. Jamali, “Active-passive brownian particle in two dimensions,” 12 2020.
- [19] J. R. Howse, R. A. L. Jones, A. J. Ryan, T. Gough, R. Vafabakhsh, and R. Golestanian, “Self-motile colloidal particles: From directed propulsion to random walk,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 99, p. 048102, Jul 2007.
- [20] S. Ebbens, “Active colloids: Progress and challenges towards realising autonomous applications,” *Current Opinion in Colloid and Interface Science*, vol. 21, pp. 14–23, 2016.
- [21] C. Bechinger, R. Di Leonardo, H. Löwen, C. Reichhardt, G. Volpe, and G. Volpe, “Active particles in complex and crowded environments,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 88, p. 045006, Nov 2016.
- [22] S. Ramaswamy, “Active matter,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2017, p. 054002, may 2017.
- [23] L. Dadhichi, A. Maitra, and S. Ramaswamy, “Erratum: Origins and diagnostics of the nonequilibrium character of active systems (2018 j. stat. mech . 123201),” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2019, p. 039901, 03 2019.
- [24] M. Reza Shaebani, A. Wysocki, R. Winkler, G. Gompper, and H. Rieger, “Computational models for active matter,” *Nature Reviews Physics*, vol. 2, p. 181–199, 03 2020.
- [25] H. Chaté, “Dry aligning dilute active matter,” *Annual Review of Condensed Matter Physics*, vol. 11, no. 1, pp. 189–212, 2020.

- 
- [26] D. Yamada, T. Hondou, and M. Sano, “Coherent dynamics of an asymmetric particle in a vertically vibrating bed,” *Phys. Rev. E*, vol. 67, p. 040301, Apr 2003.
- [27] F. Peruani, A. Deutsch, and M. Bär, “Nonequilibrium clustering of self-propelled rods,” *Phys. Rev. E*, vol. 74, p. 030904, Sep 2006.
- [28] A. Kudrolli, G. Lumay, D. Volfson, and L. S. Tsimring, “Swarming and swirling in self-propelled polar granular rods,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 100, p. 058001, Feb 2008.
- [29] R. Großmann, S. Igor, and F. Peruani, “A particle-field approach bridges phase separation and collective motion in active matter,” *Nature Communications*, vol. 11, p. 5365, 10 2020.
- [30] J. Deseigne, O. Dauchot, and H. Chaté, “Collective motion of vibrated polar disks,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 105, p. 098001, Aug 2010.
- [31] J. Deseigne, S. Léonard, O. Dauchot, and H. Chaté, “Vibrated polar disks: spontaneous motion, binary collisions, and collective dynamics,” *Soft Matter*, vol. 8, pp. 5629–5639, 2012.
- [32] G. Junot, G. Briand, R. Ledesma-Alonso, and O. Dauchot, “Active versus passive hard disks against a membrane: Mechanical pressure and instability,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 119, p. 028002, Jul 2017.
- [33] C. Scholz and T. Pöschel, “Velocity distribution of a homogeneously driven two-dimensional granular gas,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 118, p. 198003, May 2017.
- [34] M. Sandoval, “Pressure and diffusion of active matter with inertia,” *Phys. Rev. E*, vol. 101, p. 012606, Jan 2020.
- [35] L. Gutierrez-Martinez and M. Sandoval, “Inertial effects on trapped active matter,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 153, p. 044906, 07 2020.
- [36] R. Sánchez and P. Díaz-Leyva, “Self-assembly and speed distributions of active granular particles,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 499, pp. 11–19, 2018.
- [37] M. Leoni, M. Paoluzzi, S. Eldeen, A. Estrada, L. Nguyen, M. Alexandrescu, K. Sherb, and W. W. Ahmed, “Surfing and crawling macroscopic active particles under strong confinement: Inertial dynamics,” *Phys. Rev. Research*, vol. 2, p. 043299, Dec 2020.
- [38] S. Takatori, R. De Dier, J. Vermant, and J. Brady, “Acoustic trapping of active matter,” *Nature Communications*, vol. 7, p. 10694, 03 2016.
- [39] S. C. Takatori and J. F. Brady, “Inertial effects on the stress generation of active fluids,” *Phys. Rev. Fluids*, vol. 2, p. 094305, Sep 2017.
-

- 
- [40] I. Sbalzarini and P. Koumoutsakos, “Feature point tracking and trajectory analysis for video imaging in cell biology,” *Journal of Structural Biology*, vol. 151, no. 2, pp. 182–195, 2005.
- [41] C. A. Weber, T. Hanke, J. Deseigne, S. Léonard, O. Dauchot, E. Frey, and H. Chaté, “Long-range ordering of vibrated polar disks,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 110, p. 208001, May 2013.
- [42] F. Peruani and I. S. Aranson, “Cold active motion: How time-independent disorder affects the motion of self-propelled agents,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 120, p. 238101, Jun 2018.
- [43] B. ten Hagen, S. V. Teeffelen, and H. Lowen, “Non-gaussian behaviour of a self-propelled particle on a substrate,” *Condensed Matter Physics*, vol. 12, pp. 725–738, 2009.
- [44] M. Sandoval, “Anisotropic effective diffusion of torqued swimmers,” *Phys. Rev. E*, vol. 87, p. 032708, Mar 2013.
- [45] N. Grønbech-Jensen and O. Farago, “A simple and effective verlet-type algorithm for simulating langevin dynamics,” *Molecular Physics*, vol. 111, no. 8, pp. 983–991, 2013.
- [46] P. Herrera and M. Sandoval, “Maxwell-boltzmann velocity distribution for noninteracting active matter,” *Phys. Rev. E*, vol. 103, p. 012601, Jan 2021.
- [47] U. Marconi, N. Gnan, M. Maggi, and R. Leonardo, “Velocity distribution in active particles systems,” *Scientific Reports*, vol. 6, 12 2015.
- [48] I. Theurkauff, C. Cottin-Bizonne, J. Palacci, C. Ybert, and L. Bocquet, “Dynamic clustering in active colloidal suspensions with chemical signaling,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 108, p. 268303, Jun 2012.
- [49] J. Stenhammar, A. Tiribocchi, R. J. Allen, D. Marenduzzo, and M. E. Cates, “Continuum theory of phase separation kinetics for active brownian particles,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 111, p. 145702, Oct 2013.
- [50] S. C. Takatori, W. Yan, and J. F. Brady, “Swim pressure: Stress generation in active matter,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 113, p. 028103, Jul 2014.
- [51] F. Ginot, I. Theurkauff, D. Levis, C. Ybert, L. Bocquet, L. Berthier, and C. Cottin-Bizonne, “Nonequilibrium equation of state in suspensions of active colloids,” *Phys. Rev. X*, vol. 5, p. 011004, Jan 2015.
- [52] A. Solon, Y. Fily, A. Baskaran, M. Cates, Y. Kafri, M. Kardar, and J. Tailleur, “Pressure is not a state function for generic active fluids,” *Nature Physics*, vol. 11, p. 673–678, aug 2015. 8 pages + 9 SI pages, *Nature Physics* (2015).

- 
- [53] B. Hagen, S. van Teeffelen, and H. Löwen, “Brownian motion of a self-propelled particle,” *Journal of physics. Condensed matter : an Institute of Physics journal*, vol. 23, p. 194119, 05 2011.
- [54] V. Narayan, S. Ramaswamy, and N. Menon, “Long-lived giant number fluctuations in a swarming granular nematic,” *Science (New York, N.Y.)*, vol. 317, p. 105—108, July 2007.
- [55] G. A. Patterson, P. I. Fierens, F. Sangiuliano Jimka, P. G. König, A. Garcimartín, I. Zuriguel, L. A. Pagnaloni, and D. R. Parisi, “Clogging transition of vibration-driven vehicles passing through constrictions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 119, p. 248301, Dec 2017.
- [56] C. Scholz, M. Engel, and T. Pöschel, “Rotating robots move collectively and self-organize,” *Nature Communications*, vol. 9, 03 2018.
- [57] A. Deblais, T. Barois, T. Guerin, P. H. Delville, R. Vaudaine, J. S. Lintuvuori, J. F. Boudet, J. C. Baret, and H. Kellay, “Boundaries control collective dynamics of inertial self-propelled robots,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 120, p. 188002, May 2018.
- [58] G. Notomista, S. Mayya, A. Mazumdar, S. Hutchinson, and M. Egerstedt, “A study of a class of vibration-driven robots: Modeling, analysis, control and design of the brushbot,” *CoRR*, vol. abs/1902.10830, 2019.
- [59] S. Mayya, G. Notomista, D. Shell, S. Hutchinson, and M. Egerstedt, “Achieving non-uniform densities in vibration driven robot swarms using phase separation theory,” *CoRR*, vol. abs/1902.10662, 2019.
- [60] M. Mijalkov and G. Volpe, “Sorting of chiral microswimmers,” *Soft Matter*, vol. 9, pp. 6376–6381, 2013.
- [61] M. Leyman, F. Ogemark, J. Wehr, and G. Volpe, “Tuning phototactic robots with sensorial delays,” *Phys. Rev. E*, vol. 98, p. 052606, Nov 2018.
- [62] H. Löwen, “Inertial effects of self-propelled particles: From active brownian to active langevin motion,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 152, p. 040901, 01 2020.
- [63] M. Joyeux and E. Bertin, “Pressure of a gas of underdamped active dumbbells,” *Physical Review E*, vol. 93, 03 2016.
- [64] Y. Fily, Y. Kafri, A. Solon, J. Tailleur, and A. Turner, “Mechanical pressure and momentum conservation in dry active matter,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 51, 04 2017.
- [65] S. De Karmakar and R. Ganesh, “Phase transition and emergence of active temperature in an active brownian system in underdamped background,” *Phys. Rev. E*, vol. 101, p. 032121, Mar 2020.
-

- 
- [66] A. Ordemann, G. Balázsi, and F. Moss, “Pattern formation and stochastic motion of the zooplankton daphnia in a light field,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 325, pp. 260–266, 07 2003.
- [67] N. Komin, U. Erdmann, and L. Schimansky-geier, “Random walk theory applied to daphnia motion,” *Fluctuation and Noise Letters*, vol. 04, 01 2004.
- [68] A. Najafi and R. Golestanian, “Simple swimmer at low reynolds number: Three linked spheres,” *Phys. Rev. E*, vol. 69, p. 062901, Jun 2004.
- [69] J. Vollmer, A. G. Vegh, C. Lange, and B. Eckhardt, “Vortex formation by active agents as a model for daphnia swarming,” *Phys. Rev. E*, vol. 73, p. 061924, Jun 2006.
- [70] M. Polin, I. Tuval, K. Drescher, J. Gollub, and R. Goldstein, “Chlamydomonas swims with two ”gears” in a eukaryotic version of run-and-tumble locomotion,” *Science (New York, N.Y.)*, vol. 325, pp. 487–490, 08 2009.
- [71] B. Friedrich, I. Riedel-Kruse, J. Howard, and F. Jülicher, “High-precision tracking of sperm swimming fine structure provides strong test of resistive force theory,” *The Journal of experimental biology*, vol. 213, p. 1226—1234, April 2010.
- [72] B. M. Friedrich and F. Jülicher, “Flagellar synchronization independent of hydrodynamic interactions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 109, p. 138102, Sep 2012.
- [73] R. R. Bennett and R. Golestanian, “Emergent run-and-tumble behavior in a simple model of chlamydomonas with intrinsic noise,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 110, p. 148102, Apr 2013.
- [74] S. Otte, E. Perez Ipiña, R. Pontier-Bres, D. Czerucka, and F. Peruani, “Statistics of pathogenic bacteria in the search of host cells,” *Nature Communications*, vol. 12, 03 2021.
- [75] F. Peruani and L. G. Morelli, “Self-propelled particles with fluctuating speed and direction of motion in two dimensions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 99, p. 010602, Jul 2007.
- [76] R. Großmann, F. Peruani, and M. Bär, “Diffusion properties of active particles with directional reversal,” vol. 18, p. 043009, apr 2016.
- [77] S. Samin and R. van Roij, “Self-propulsion mechanism of active janus particles in near-critical binary mixtures,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 115, p. 188305, Oct 2015.
- [78] J. Gomez-Solano, S. Samin, C. Lozano, P. Ruedas-Batuecas, R. Roij, and C. Bechinger, “Tuning the motility and directionality of self-propelled colloids,” *Scientific Reports*, vol. 7, p. 14891, 11 2017.



- 
- [79] J. Voß and R. Wittkowski, “On the shape-dependent propulsion of nano- and microparticles by traveling ultrasound waves,” *Nanoscale Adv.*, vol. 2, pp. 3890–3899, 2020.
- [80] D. Debnath, P. K. Ghosh, V. R. Misko, Y. Li, F. Marchesoni, and F. Nori, “Enhanced motility in a binary mixture of active nano/microswimmers,” *Nanoscale*, vol. 12, pp. 9717–9726, 2020.
- [81] S. Babel, B. ten Hagen, and H. Löwen, “Swimming path statistics of an active brownian particle with time-dependent self-propulsion,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2014, p. P02011, feb 2014.
- [82] E. Lauga, “Enhanced diffusion by reciprocal swimming,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 106, p. 178101, Apr 2011.

Robots hexbug-nano atrapados y un sistema de materia activa inercial con propulsión dependiente del tiempo.



LUIS LORENZO GUTIERREZ MARTINEZ

ALUMNO

REVISÓ

MTRA. ROSALÍA SERRANO DE LA PAZ  
DIRECTORA DE SISTEMAS ESCOLARES

Con base en la Legislación de la Universidad Autónoma Metropolitana, en la Ciudad de México se presentaron a las 9:00 horas del día 25 del mes de enero del año 2022 POR VÍA REMOTA ELECTRÓNICA, los suscritos miembros del jurado designado por la Comisión del Posgrado:

DR. MARIO SANDOVAL ESPINOZA  
DR. RODRIGO ANTONIO SOTO BERTRAN  
DR. FERNANDO MIGUEL PERUANI SAN ROMAN

Bajo la Presidencia del primero y con carácter de Secretario el último, se reunieron para proceder al Examen de Grado cuya denominación aparece al margen, para la obtención del grado de:

MAESTRO EN CIENCIAS (FISICA)

DE: LUIS LORENZO GUTIERREZ MARTINEZ

y de acuerdo con el artículo 78 fracción III del Reglamento de Estudios Superiores de la Universidad Autónoma Metropolitana, los miembros del jurado resolvieron:

**APROBAR**

Acto continuo, el presidente del jurado comunicó al interesado el resultado de la evaluación y, en caso aprobatorio, le fue tomada la protesta.

DIRECTOR DE LA DIVISIÓN DE CBI

DR. JESUS ALBERTO OCHOA TAPIA

PRESIDENTE

DR. MARIO SANDOVAL ESPINOZA

VOCAL

DR. RODRIGO ANTONIO SOTO BERTRAN

SECRETARIO

DR. FERNANDO MIGUEL PERUANI SAN ROMAN

El presente documento cuenta con la firma –auténtica, escaneada o digital, según corresponda- del funcionario universitario competente, que certifica que las firmas que aparecen en esta acta – Temporal, digital o dictamen- son auténticas y las mismas que usan los c.c. profesores mencionados en ella