



Casa abierta al tiempo

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA**  
**Unidad Iztapalapa**

**Maxwell-Boltzmann velocity distribution for  
noninteracting active matter and the  
Mean-first passage time of active particles on  
curved substrates**

Tesis presentada para obtener el grado de Maestro en  
Ciencias (Física) por:

**Fís. Pedro Emilio Herrera Ávila**

**Asesor: Dr. Mario Sandoval Espinoza**

Sinodales:

Dr. Rodrigo Antonio Soto Bertran

Dr. José Ramón Alvarado

Dr. Mario Sandoval Espinoza

17/12/2021



# Agradecimientos

Muchas gracias a mi Asesor, el Dr. Mario Sandoval Espinoza, por guiarme en este fascinante mundo de la Ciencia, pues, la pasión que ha compartido conmigo ha sido una fuente infinita de inspiración. Así mismo le doy las gracias a mi pequeña familia que a pesar de la tormenta por la que hemos tenido que atravesar, durante años, hemos logrado mantenernos fuertes y unidos. De igual manera, a mis amigos de la UAMI, en especial, a Luis Martínez, que me ha mostrado el verdadero significado de la amistad y a Perla Nicanor, por mantenerse cerca durante este recorrido donde aprendimos que lo único que no cambia es la esencia de lo que somos, aquella que nos hace únicos y especiales.

Agradezco también el apoyo del CONACYT, ya que sin aquel no hubiera podido llevar a cabo este fantástico viaje, así como al Dr. Rodrigo Antonio Soto Bertran y el Dr. José Ramón Alvarado por haber revisado de manera exhaustiva esta tesis y haber brindado comentarios muy valiosos que sirvieron para complementar este trabajo.



*Con Amor a mi Padre, Emiliano L. Herrera B. ,  
quien no tuvo la oportunidad de verme  
emprender este proyecto de vida.*



# Índice general

Contenido . . . . .	I
Motivación . . . . .	IV
<b>1. Movimiento Browniano</b>	<b>1</b>
1.1. Historia . . . . .	1
1.2. Einstein y el movimiento Browniano . . . . .	3
1.3. Langevin y el movimiento Browniano . . . . .	10
<b>2. Formalismo de los procesos estocásticos</b>	<b>13</b>
2.1. Formalismo de Langevin . . . . .	14
2.2. Formalismo de Fokker Planck . . . . .	18
2.3. Límite sobreamortiguado . . . . .	25
<b>3. Partículas Activas Brownianas</b>	<b>29</b>
3.1. Modelo ABP . . . . .	29
3.1.1. Límite sobreamortiguado . . . . .	31
3.1.2. Límite semi-amortiguado . . . . .	35
3.1.3. Efectos de inercia rotacional (2D) . . . . .	36
<b>4. Distribución de velocidades de “Maxwell-Boltzmann” para partículas activas</b>	<b>39</b>
4.1. Introducción . . . . .	39
4.2. Ecuación de Fokker-Planck para partícula activa libre . . . . .	41
4.2.1. Solución a la ecuación marginal de velocidades . . . . .	42
4.2.2. Ecuaciones de Jerarquía . . . . .	44
4.3. Método perturbativo . . . . .	47
4.3.1. Solución a orden cero de $\tilde{p}_0$ . . . . .	49
4.3.2. Solución a primer orden de $\tilde{p}_0$ . . . . .	50
4.3.3. Solución a segundo orden de $\tilde{p}_0$ . . . . .	51
4.4. Distribución de Velocidades . . . . .	54
4.4.1. Transformada inversa de $\tilde{P}$ . . . . .	54

4.4.2.	Función de distribución de velocidades para partículas activas con inercia . . . . .	55
<b>5.</b>	<b>The mean first-passage time of active particles on curved substrates</b>	<b>63</b>
5.1.	Introducción . . . . .	63
5.2.	ABP's en espacios curvos . . . . .	65
5.2.1.	Ecuaciones de movimiento . . . . .	66
5.2.2.	Componentes contravariantes de las ecuaciones de movimiento . . . . .	69
5.2.3.	Ruido traslacional . . . . .	71
5.2.4.	Ecuaciones de movimiento . . . . .	73
5.3.	Ecuación de Smoluchowski:	
ABP's sobre curvas planas . . . . .		73
5.3.1.	Método de Novikov's . . . . .	76
5.3.2.	Tiempos largos . . . . .	77
5.3.3.	Estado estacionario ( $t \rightarrow \infty$ ) . . . . .	79
5.4.	MFPT en curvas planas . . . . .	82
5.4.1.	Backward Kolmogorov equation . . . . .	87
5.4.2.	MFPT para ABP's . . . . .	88
<b>6.</b>	<b>Conclusión general</b>	<b>96</b>
<b>7.</b>	<b>Apéndices</b>	<b>98</b>
7.1.	Apéndices A: Ecuaciones ordinarias . . . . .	98
7.1.1.	$A_1$ . . . . .	98
7.1.2.	$A_2$ . . . . .	99
7.1.3.	$A_3$ . . . . .	100
7.2.	Apéndice B: Condiciones iniciales . . . . .	101
7.2.1.	$n=0$ . . . . .	101
7.2.2.	$n=1$ . . . . .	102
7.2.3.	$n=2$ . . . . .	102
7.3.	Apéndice C: Símbolos de Christoffel . . . . .	103
7.4.	Apéndice D: Conexión entre Ito y Stratonovich . . . . .	104

# Contenido

Durante la Maestría en Ciencias Física dediqué mi tiempo en resolver dos problemas en particular: la distribución de velocidades de materia activa no interactiva y el tiempo de primer paso para partículas activas en curvas planas. La intención de abordar dichos problemas fue el de adquirir durante su desarrollo las herramientas necesarias, tanto técnicas, como teóricas, para poder resolverlos de manera satisfactoria.

Es importante mencionar que durante mi Licenciatura en Física comencé a abordar el movimiento de partículas activas en curvas planas junto a mi actual asesor, el Dr. Mario Sandoval, siendo fruto de ello fue un artículo publicado en *Molecular Physics* [19] en el 2019. De ello surgió la idea de abordar el problema de primer paso del modelo que había caracterizado, y del que había aprendido a realizar simulaciones de las ecuaciones de Langevin en MatLab. Sin embargo, para ello era necesario ahora emplear el formalismo de Fokker-Planck, así que durante los primeros meses de mi maestría me dediqué a estudiar las bases de este formalismo, que a pesar de estar ya bien cimentadas para sistemas pasivos, existen huecos en donde la mayoría de textos no se abordan. Es por ello que decidí poner en los primeros capítulos de esta tesis las ideas, que para mi, son las más importantes para abordar un sistema estocástico. Finalmente, al tener éxito en la obtención del tiempo de primer paso, y aprovechando que ya estaba un poco familiarizado con el formalismo de Fokker-Planck, mi asesor el Dr. Sandoval me motivó a abordar la ecuación de Fokker-Planck activa, con la intención de demostrar, hasta donde fuera posible, el efecto que tiene la inercia rotacional, en los sistemas activos. A pesar de no lograr caracterizar, hasta el momento, completamente dicha ecuación, dimos un gran paso en la obtención de la función de distribución de velocidades para este tipo de sistemas con el efectos de la inercia.

Por lo tanto, recapitulando, los resultados que estamos reportando en esta tesis surgen de dos trabajos de investigación independientes. Por un lado tenemos la caracterización de materia activa con efectos de Inercia rotacional a partir del formalismo de Fokker-Planck en el espacio plano unidimensional, y por otro, la obtención del tiempo promedio de primer paso (MFPT por

sus siglas en inglés) para un modelo de partículas activas Brownianas que se restringen a moverse sobre curvas planas en el límite sobreamortiguado.

Sobre la primer línea de investigación, en el capítulo 4 se describe, de manera general, la forma en que obtuvimos la función de distribución de velocidades para un modelo de partículas activas Brownianas (ABP's, Active Brownian Particles) no interactuantes donde el efecto debido a la inercia rotacional no lo hemos despreciado debido a que éste no había sido reportado con el formalismo de Fokker-Planck, sino, solo en trabajos previos donde emplean el formalismo de Langevin [14][23-25]. En el capítulo 3 introducimos de manera detallada el modelo matemático que estamos empleando de ABP's en el espacio plano, así como hemos introducido todas las herramientas matemáticas que usamos para su desarrollo en el capítulo 2. Es importante mencionar que por su relevancia, los resultados obtenidos fueron publicados en el artículo "Maxwell-Boltzmann velocity distribution for noninteracting active matter" en la revista *Physical Review E* en 2021. [20]

Por otro lado, en la segunda línea de investigación hallamos una expresión teórica para el Mean First-Passage Time (MFPT) de un modelo sobreamortiguado de partículas Brownianas activas que se desplazan sobre cualquier 1-variedad Riemanniana (Capítulo 5), de tal manera que en el mismo hemos ido exponiendo de manera sistemática todas las herramientas necesarias para su obtención. Partimos analizando el modelo matemático de ABP's, que se mueven sobre cualquier curva plana, que emplearemos, así como de las respectivas ecuaciones de Langevin que caracterizan el Modelo. Posteriormente empleamos el formalismo de Novikov para la obtención de la ecuación de Smoluchowski asociada a la evolución temporal de la función de distribución de probabilidad de las variables aleatorias de nuestro modelo. Finalmente realizamos una analogía del MFPT de partículas pasivas en 1D, con nuestro modelo, donde empleamos la ecuación de Smoluchowski en su forma backward para poder hallar la expresión teórica que hemos mencionado anteriormente del MFPT.

Dentro de ambas líneas de investigación, hemos realizado también un análisis de los resultados obtenidos teóricamente a partir de la comparación de estos con simulaciones de las ecuaciones de Langevin para casos particulares.

Sin embargo, antes de entrar a los detalles peculiares y particulares en cada línea de investigación, hemos decidido agregar el capítulo 1 para que aquellas personas ajenas a los procesos estocásticos puedan apreciar la historia del fenómeno que hoy conocemos como Movimiento Browniano, y con ella, también vislumbrar la evolución del pensamiento humano en el entendimiento de los fenómenos estocásticos. Para complementar la historia del estudio del Movimiento Browniano, el capítulo 2 mostramos de manera sistemática, y compacta, las dos herramientas que, hoy en día, poseemos para

caracterizar este tipo de sistemas: el formalismo de Langevin y formalismo de Fokker-Planck. Además mostramos los métodos usando como ejemplo el movimiento Browniano clásico (todo ello para movimiento en el espacio plano, pues como se mencionó párrafos atrás, el movimiento en curvas se introduce en el capítulo 5).

Para poder visualizar el salto entre lo que se considera materia pasiva y materia activa, hemos agregado el capítulo 3, donde definimos el concepto de este tipo de Materia, así como su importancia en la actualidad. También en este mismo capítulo (como mencionamos anteriormente) introducimos el modelo matemático de ABP que emplearemos posteriormente en nuestra investigación del movimiento de ABP en espacios planos, así como algunos resultados relevantes que se encuentran en la literatura y que son de vital importancia para poder visualizar hasta que punto se ha logrado caracterizar a este tipo de sistemas activos.

Finalmente, en los Apéndices 7 se encuentran algunos desarrollos matemáticos que podrían ayudar al lector en la verificación de los resultados aquí reportados.

Sin más que agregar, espero tengan un viaje emocionante a través de las páginas de este trabajo, bienvenidos.

# Motivación

En la naturaleza existen sistemas formados por conjuntos de elementos que tienen la capacidad individual de transformar la energía de su ambiente en movimiento autodirigido, es decir, de autopropulsarse. Esta capacidad la apreciamos en un cardumen de peces, una parvada de aves, una suspensión de bacterias, y muchos otros conjuntos de seres vivos. Esta cualidad marca la diferencia entre los sistemas activos y los sistemas pasivos, pues, los elementos de estos últimos no tienen la capacidad de autopropulsarse. Recordemos que la dinámica de un sistema de elementos pasivos, como las moléculas de un gas, es afectada por fuerzas externas, e internas, sobre, o entre, cada elemento<sup>1</sup>, mientras que la dinámica de un sistema activo también está sujeta al movimiento intrínseco de cada elemento. Además, la capacidad de autopropulsión implica que el sistema se encuentre fuera del equilibrio termodinámico, por lo que, el estudio de este tipo de sistemas nos permite obtener resultados teóricos a partir de los formalismos empleados en la teoría de procesos en el equilibrio (véase Fig. 2)

Formalmente la materia activa se define como un conjunto de  $N$  elementos capaces de transformar energía de su entorno en movimiento autodirigido, por lo que entonces, no sólo estamos limitados a elementos biológicos, si no también a elementos artificiales. Los humanos, los insectos, las plantas, los animales, los virus, las bacterias, las células, los motores biológicos, son tipos de materia activa biológica, mientras que las partículas Janus<sup>2</sup>, los Hexbugs<sup>3</sup>, son ejemplos de materia activa artificial (véase Fig.1)

Pero ¿Es posible caracterizar ese tipo de sistemas?, ¿Qué es lo interesante?. Sabemos que el movimiento individual de cada elemento es intrínsecamente aleatorio, entonces, al igual que en el estudio de materia pasiva, los efectos macroscópicos están condensados en promedios estadísticos, y no en la dinámica individual de cada elemento. El efecto de los elementos activos

---

<sup>1</sup>Si las moléculas interactúan entre sí.

<sup>2</sup>Partículas micrométricas recubiertas por dos distintos materiales que al contacto con alguna solución son capaces de autopropulsarse.

<sup>3</sup>Mini-bots capaces de autopropulsarse debido a vibraciones.

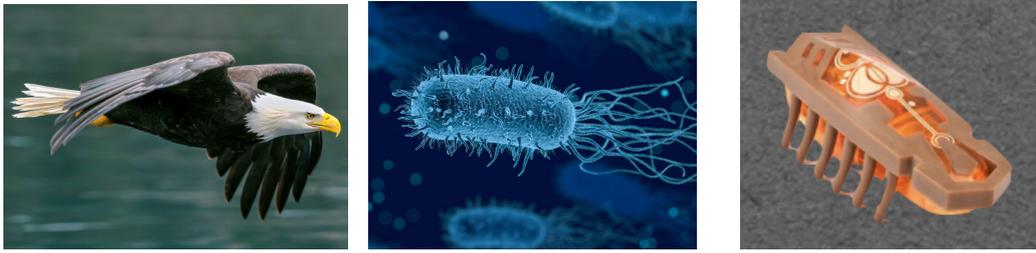
en las cantidades macroscópicas de sistemas pasivos, tales como la presión, la temperatura, el desplazamiento cuadrático medio (MSD), o la rapidez cuadrática media (MSS), son de gran interés ya que estas cantidades dependerán de la autopropulsión de sus elementos en comparación a los resultados de sistemas pasivos que dependen solo de cantidades del sistema, además de nuevas cantidades de interés tales como la motilidad. Todo lo anterior en sistemas con elementos de escala microscópica y mesoscópica, sin embargo, la materia activa está presente también en escala macrométrica, por lo que podríamos pensar en un  $\tilde{N}u$ , cuyo movimiento es autodirigido, pero totalmente impredecible <sup>4</sup>, sin embargo, cuando tenemos una manada de ellos ocurre algo fascinante, un "movimiento colectivo" donde pareciera haber desaparecido el comportamiento individual de cada elemento para dar paso a una danza casi perfecta de materia blanda (véase Fig.3). Dado que este efecto no es exclusivo para los  $\tilde{N}u$ , si no que es un fenómeno característico de diversos conjuntos de especies animales, es de interés comprender qué hay detrás de la sincronización instantánea entre los elementos del conjunto colectivo para posteriormente recrearlo en conjuntos de elementos artificiales y así aprovechar esta característica en diversas aplicaciones.

Dado que es necesario optar por un modelo que generalice a cualquier sistema activo, sin importar su escala, nos toparemos límites donde propiedades tales como la masa e inercia rotacional de sus elementos pueden ser muy pequeñas, y entonces, las propiedades del medio donde se desplazan son relevantes para su movimiento en comparación a los efectos debido a la inercia [14]. Por otro lado tendremos sistemas macrométricos donde el efecto de las fluctuaciones del medio son despreciables, los efectos de inercia son visibles [35], y donde la aleatoriedad que regirá al sistema será la intrínseca de los elementos que lo conforman. Sin embargo, existen sistemas que se encuentran entre la interfaz de lo micrométrico y macrométrico, en donde a pesar de que su inercia es pequeña, no se puede despreciar, pues la capacidad de autopropulsarse hace que estas propiedades sean más relevantes que en sistemas pasivos [35].

Por lo tanto, estudiar este tipo de sistemas nos permite comprender algunas características de estos fenómenos fuera del equilibrio, dado que, hasta hoy en día no existe una teoría completa para describir este tipo de sistemas, aprovechando todo el formalismo que existe en el estudio de sistemas estocásticos.

---

<sup>4</sup>Debido a que este depende totalmente del libre albedrío.



(a) Águila Real

(b) Bacteria

(c) Hexbugs

Figura 1: Ejemplos de materia activa: entes biológicos y artificiales que son capaces de autopropulsarse en un medio.



(a) Elemento artificial



(b) Elemento biológico

Figura 2: Sistemas fuera del equilibrio cuyos elementos toman energía de su entorno: a) en el caso artificial se transforma energía de una fuente de alimentación (Batería alcalina); b) en el caso biológico se toma energía a partir de los alimentos que el elemento consume.



(a) Cardumen



(b) Manada de Ñus

Figura 3: Movimiento colectivo: fenómeno particular en sistemas activos biológicos que muestra características peculiares no visualizadas en sistemas pasivos, tal como, a-b) aglomeramiento de materia o cambios de fase.

# Capítulo 1

## Movimiento Browniano

La materia está constituida por elementos fundamentales tales como los Bosones y los Leptones (hasta donde sabemos...), sin embargo, esta concepción de la estructura fundamental de la materia es reciente. Confirmar la existencia de átomos y moléculas, como los elementos fundamentales de la materia (el viejo paradigma), fue un parte aguas en la historia de la Física del siglo XIX, y en particular, de la Física estadística, pues, ésta tuvo un papel fundamental en la comprensión y caracterización de propiedades macroscópicas de un sistema a partir de la estadística de los elementos individuales que componen el mismo. La física estadística del equilibrio quedó sentada aún cuando la existencia de moléculas era sólo una hipótesis, sin embargo, fue la física estadística aplicada a fenómenos fuera del equilibrio, en particular con el estudio del movimiento Browniano, la que logró confirmar de manera contundente la existencia de éstas. En este capítulo haremos un recuento sobre la manera en que fue evolucionando la formulación matemática del movimiento Browniano, de tal manera que empezaremos analizando este fenómeno a partir de los argumentos puramente físicos empleados por Albert Einstein, o por Langevin, para caracterizarlo. Todo aquello para que después abordemos el formalismo actual que existe para el estudio de procesos estocásticos, formalismo que emplearemos posteriormente para caracterizar sistemas activos, tales como las partículas activas Brownianas.

### 1.1. Historia

En el año de 1827 Robert Brown , Médico y Botánico escocés, describió por primera vez el movimiento errático de partículas de polen suspendidas en agua al estar estudiando la impregnación de éstas en el proceso de ovulación vegetal. En palabras del propio Robert Brown: “ I observed many of them

(Polen particles) very evidently in motion; their motion consisting not only of a change of place in the fluid..." [7], sin embargo, no pudo explicar la causa de tal movimiento, pero, pudo darse cuenta de que éste no estaba asociado sólo a elementos orgánicos sino también a inorgánicos. Él acuñó el término "Molécula Activa" a este tipo de partículas, con el cual podemos inferir que él podría haber pensado que el movimiento era intrínseco a las partículas, y no al medio en donde estaba sumergido. En reconocimiento a su observación, al movimiento azaroso en un sistema se le denomina Movimiento Browniano.

La causa del movimiento errático de las partículas observadas por Brown podía ser asociada a distintos procesos físicos, tales como a un gradiente de temperatura, a la presencia de fuerzas externas, o a la vaporización del fluido en el que estaban, sin embargo, ninguna de estas explicaciones era correcta. Recordemos que la existencia de átomos como parte fundamental de la materia no había sido aceptada debido a la escasa evidencia científica hasta ese momento, pero, en el año de 1877 Delsaux propuso la idea de que el movimiento errático de las partículas suspendidas era debido a las colisiones de ella misma con las moléculas que formaban el medio en donde se encontraba [46]. Fue Albert Einstein, partiendo de una idea como la de Delsaux (se desconoce si A. Einstein sabía de la propuesta de Delsaux) quién caracterizó de manera analítica el movimiento errático de las partículas brownianas en su artículo "On the movement of small particles suspended in stationary liquids required by the molecular-kinetic theory of heat" de 1905, pero fue Jean Perrin en 1909 quien experimentalmente validó sus resultados, y con ello finalmente se verificó la existencia de los átomos y moléculas como la estructura de la Materia.

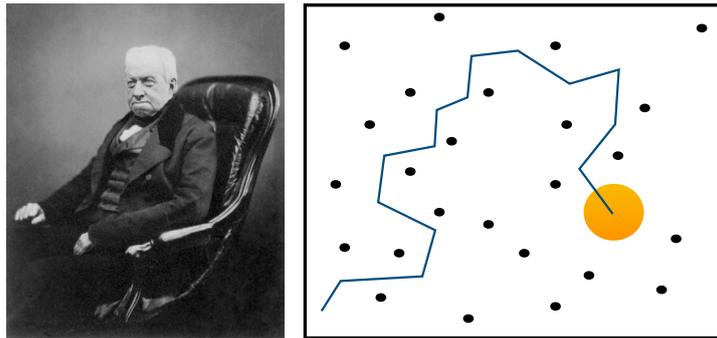


Figura 1.1: A la izquierda, fotografía de Robert Brown. A la derecha, esquema del fenómeno que observó Robert Brown al estudiar el papel del polen en el proceso de ovulación vegetal.

## 1.2. Einstein y el movimiento Browniano

Pero, ¿Cómo Einstein caracterizó el movimiento de partículas erráticas?, bueno, veamos la manera en que Einstein abordó el problema:

Consideremos  $M$  partículas suspendidas en un fluido que ocupa un volumen finito  $V$ . El fluido está constituido por  $N$  partículas puntuales que están desplazándose y colisionando entre sí, de manera elástica, en contra las partículas suspendidas y contra las fronteras que delimitan el volumen. Como sabemos, la dinámica de un sistema de  $M$  partículas suspendidas en un fluido formado por  $N$  partículas puntuales clásicamente quedaría determinado al resolver el sistema de  $N+M$  ecuaciones diferenciales de segundo orden dado por las leyes de Newton. Para ello, también es necesario conocer las condiciones iniciales de todos los elementos que forman el sistema, algo que es poco práctico e incluso imposible de hacer cuando  $N$  es del orden del número de Avogadro ( $10^{23}$ ).

La genialidad de Albert Einstein yace en que además de considerar como causa del movimiento Browniano una hipótesis igual a la que consideró Delsaux en 1877 (donde la causa del movimiento errático de la partícula Browniana eran las colisiones de las partículas del medio con ella) caracterizó el sistema considerando únicamente el efecto estadístico de los  $N$  elementos que formaban el medio sobre el movimiento las partículas suspendidas (Brownianas).

El estudio de las propiedades macroscópicas de un sistema a partir de la estadística de sus constituyentes nació como una herramienta para poder reproducir las Leyes de la Termodinámica a partir de la suposición de la existencia de partículas. En el año de 1738 Bernoulli sentó las bases de lo que hoy conocemos como Teoría cinética de los gases, en la cual se consideraba que un gas era compuesto por un número muy grande de moléculas que se desplazaban en todas direcciones. Él consideró que los impactos de las moléculas con alguna superficie causaba lo que conocemos como la presión y también que lo que medimos como temperatura no era más que la energía cinética de sus constituyentes. Cabe aclarar que en esa época estas moléculas eran sólo un andamio matemático, pues la materia se consideraba como un continuo. Posteriormente estas ideas las retomaron Maxwell y Boltzmann, y emplearon por primera vez aspectos estadísticos de variables microscópicas para obtener propiedades macroscópicas, de tal manera que desarrollaron lo que hoy en día conocemos como Mecánica Estadística del equilibrio.

Albert Einstein se basó, al igual que Maxwell y Boltzmann, en la Teoría Cinética para describir el movimiento de las partículas Brownianas, tal y como lo menciona en su artículo de 1905 "On the movement of small particles suspended in stationary liquids required by the molecular-kinetic theory of

heat” [1].

Para resolver el problema, Einstein hace una analogía entre la difusión de un soluto en un solvente y el movimiento de partículas suspendidas en un fluido, esto debido a que un soluto tenía que estar formado por partículas, sólo que éstas eran de menor tamaño que las Brownianas<sup>1</sup>. La difusión es un proceso espontáneo que ocurre cuando dos sistemas, inicialmente en equilibrio y separados por una pared, se dejan interactuar al eliminar la pared que los separaba, causando que después de cierto tiempo el sistema final sea homogéneo. La difusión al ser un proceso Irreversible fuera del equilibrio no podía explicarse con lo que hoy en día conocemos como Termodinámica Clásica (Termostática), sin embargo, esta fue caracterizada empíricamente por Fick en el año de 1885, proponiendo lo que hoy conocemos como las Leyes de Fick, basándose en las leyes de difusión que habían propuesto en la época, tal como la Ley de difusión de Calor de Fourier.

En un proceso de difusión selectivo [23] (tal y como ocurre en la disolución de un soluto en un solvente) la pared que separa a los subsistemas es una membrana semi-impermeable que permite el intercambio de partículas en una sola dirección (del solvente al soluto). El flujo de solvente a través de la membrana se debe a una diferencia de presiones que aparece en la membrana, llamada presión Osmótica, que ocurre por la diferencia de concentraciones del soluto. Debido a que las partículas del soluto no pueden atravesar la membrana semipermeable, el volumen inicial de cada subsistema tiende a cambiar <sup>2</sup> y entonces simultáneamente aparece una diferencia de altura que provoca una presión hidrostática que se opone al flujo de solvente. La presión osmótica empieza a disminuir por que la diferencia de concentraciones de partículas del soluto disminuye. Llega un punto en donde la presión osmótica se iguala a la presión hidrostática debida al fluido desplazado, y entonces el flujo de solvente se detiene y el sistema llega a un estado estacionario. Si Einstein podía obtener la presión osmótica, que se produce en la membrana durante el proceso de difusión, bajo los argumentos de la Teoría Cinética, entonces podría caracterizar la difusión de partículas Brownianas (Si la disolución es un proceso de difusión de materia, entonces, el movimiento Browniano también lo es, solo que la densidad y tamaño de partículas cambia) .

Einstein efectivamente demostró, al hacer un análisis en la energía libre de Helmholtz ( $F$ ), que a partir de los argumentos de la teoría cinética podía obtener la presión osmótica . A partir del resultado, y usando Hidrodinámica clásica, pudo demostrar que las partículas se difundían en el fluido con un

---

<sup>1</sup>Podríamos pensar en una solución de “partículas Brownianas” que se añade al fluido.

<sup>2</sup>No el volumen total del sistema, ni la forma del recipiente que lo contiene, pues la membrana queda fija.

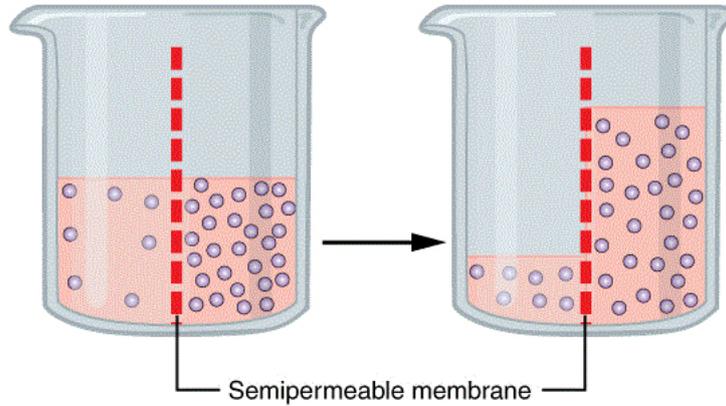


Figura 1.2: Diagrama que ejemplifica el proceso de difusión osmótica. Inicialmente tenemos dos sistemas separados por una membrana semipermeable, que permite el paso del solvente, al soluto. Debido a la diferencia de concentraciones a ambos lados de la membrana, el solvente fluye hacia el soluto, hasta que desaparece esta diferencia. La presión necesaria para mantener al sistema en estado estacionario, recibe el nombre de presión osmótica.

coeficiente de difusión  $D$  (llamada relación de Einstein-Stokes) dado por:

$$D = \frac{RT}{6\pi N\eta r} \quad (1.1)$$

Sin embargo, aun faltaba por determinar cuál era la ecuación de difusión de la materia a partir de los argumentos de la Teoría Cinética. Veamos, la difusión de materia viene dada por la segunda Ley de Fick y establece que dada la concentración  $c(x, t)$ , (en una dimensión), ésta evoluciona de la forma:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\nabla^2 c \quad (1.2)$$

donde  $D$  es el coeficiente de Difusión.

Einstein debía de demostrar, con base en argumentos de la Teoría Cinética, que la ecuación que regía a las Partículas suspendidas era la ecuación de difusión de Fick con coeficiente de difusión  $D$  dado por [Ec.1.1].

### Ecuación de Difusión de Einstein

El modelo de Einstein, como vimos, se basa en la idea de  $M$  moléculas suspendidas dentro de un sistema de  $N$  partículas puntuales. Se establece que las  $M$  moléculas no tienen interacción entre ellas, y que además, su movimiento es independiente cada cierto intervalo de tiempo  $\tau$ , siendo este intervalo de tiempo suficientemente grande para que el sistema no sea determinista,

y no tan grande, para que éste no afecte a las mediciones macroscópicas de alguna variable del sistema.

Pensemos en un sistema unidimensional, es decir, donde las partículas suspendidas solo pueden moverse sobre el eje  $x$ , entonces la posición de cada partícula en un intervalo de tiempo  $\tau$  incrementará en

$$x \rightarrow x + \Delta x \quad (1.3)$$

donde  $\Delta x$  es el incremento en la posición debido a la colisión de las partículas del fluido sobre la partícula suspendida y es considerado como aleatorio, es decir, tiene asociado una función de densidad de probabilidad dada por  $\phi(\Delta x)$ .

Debido a la isotropía del espacio, pues no hay preferencia en la dirección, se debe cumplir la condición en la función de densidad de probabilidad:

$$\phi(\Delta x) = \phi(-\Delta x) \quad (1.4)$$

además de la propiedad de normalización que permite la conservación de probabilidad:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi(\Delta x) d\Delta x = 1 \quad (1.5)$$

Veamos, la densidad de partículas suspendidas en el espacio vendrá dada por:

$$\rho(x, t) = \frac{n(x, t)}{l} \quad (1.6)$$

por lo que entonces el número de partículas dentro de un intervalo diferencial de longitud  $dx$  al tiempo  $t$  será

$$n(x, t) = \rho(x, t) dx \quad (1.7)$$

donde hemos considerado que  $dl = dx$ .

Entonces, ¿Cuántas partículas habrá en  $x$  al tiempo  $t + \tau$ ? Pues, todas las partículas que estaban en  $x + \Delta x$  en el tiempo  $t$  que se desplacen una distancia  $-\Delta x$  al tiempo  $t + \tau$  serán las que contribuyan a  $n(x, t + \tau)$ , pero puesto que la posición de cada una de ellas es aleatoria, entonces  $n(x, t + \tau)$  será igual al número de partículas que están en  $x + \Delta x$  y que tuvieron la probabilidad de desplazarse la distancia  $-\Delta x$ , i.e. de manera explícita:

$$n(x, t + \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} n(x + \Delta x, t) \phi(-\Delta x) d\Delta x \quad (1.8)$$

Multiplicando por  $dx$  a ambos lados y usando la propiedad de isotropía [Ec.1.4], obtenemos:

$$\rho(x, t + \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x + \Delta x, t) \phi(\Delta x) d\Delta x \quad (1.9)$$

Pero, dado que  $\tau$  es pequeño:

$$\rho(x, t + \tau) \approx \rho(x, t) + \tau \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} + O(\tau^2) \quad (1.10)$$

y también  $\Delta x$  :

$$\rho(x + \Delta x, t) \approx \rho(x, t) + \Delta x \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial x} + \frac{1}{2} (\Delta x)^2 \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} + O(\Delta x^3) \quad (1.11)$$

al sustituir en [Ec.1.9] obtenemos:

$$\begin{aligned} \rho(x, t) + \tau \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} + \dots &= \\ \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \rho(x, t) + \Delta x \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial x} + \frac{1}{2} \Delta x^2 \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} \right] \phi(\Delta x) d\Delta x & \\ = \rho(x, t) \int_{-\infty}^{\infty} \phi(\Delta x) d\Delta x + \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial x} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(\Delta x) \Delta x d\Delta x & \\ + \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} \phi(\Delta x) (\Delta x)^2 d\Delta x + \dots & \end{aligned} \quad (1.12)$$

Ahora, dado que  $\phi(\Delta x)$  es una función par las integrales con potencia  $\Delta x$  impar se anulan y las integrales con potencias pares se mantienen, además, se desprecian ordenes superiores a  $(\Delta x)^3$  y entonces bajo estas consideraciones se obtiene:

$$\begin{aligned} \rho(x, t) + \tau \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} &= \rho(x, t) \int_{-\infty}^{\infty} \phi(\Delta x) d\Delta x \\ &+ \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} \phi(\Delta x) (\Delta x)^2 d\Delta x \end{aligned} \quad (1.13)$$

donde emplearemos [Ec.1.5] para que nuestra expresión tome la forma:

$$\rho(x, t) + \tau \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \rho(x, t) + \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} \phi(\Delta x) (\Delta x)^2 d\Delta x \quad (1.14)$$

lo que implica que:

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{\tau} \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} \phi(\Delta x) (\Delta x)^2 d\Delta x \quad (1.15)$$

En esta expresión podemos reconocer que el coeficiente de difusión de Einstein toma la forma:

$$D = \frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} \phi(\Delta x) (\Delta x)^2 d\Delta x \quad (1.16)$$

Y por lo tanto que recuperemos la ecuación de Difusión de Fick:

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} \quad (1.17)$$

donde esta vez  $\rho(x, t)$  es una variable aleatoria donde  $\rho(x, t)dx$  representa el número de partículas suspendidas que incrementan su posición en  $\Delta x$  al tiempo  $t + \tau$ .

### Solución a la ecuación de Difusión de Einstein

Ahora sabemos que el movimiento Browniano es un proceso de difusión que rige su comportamiento por la ecuación 1.17, sin embargo el proceso al estar asociado a la función de distribución de probabilidad debemos de emplear un método de solución de ecuaciones diferenciales parciales que nos permitan emplear las condiciones iniciales para su solución particular. Entonces, para obtener la solución a [Ec.1.17] primero haremos la transformación al espacio de Fourier, donde:

$$\tilde{\rho} = \int_{-\infty}^{\infty} \rho e^{ikx} dx \quad (1.18)$$

Al emplear [Ec.1.18] podemos verificar que nuestra [Ec.1.17] se reescribe como una ecuación de primer orden de la forma:

$$\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} = -Dk^2 \tilde{\rho} \quad (1.19)$$

Para la condición inicial debemos considerar que todas las partículas se encuentran concentradas en  $x$  al tiempo  $t = 0$ , es decir:

$$\rho(x, 0) = M\delta(x - x_0) \quad (1.20)$$

donde tomaremos como caso particular  $x_0 = 0$

Podemos verificar que la solución particular al problema vendrá dada por<sup>3</sup>:

$$\rho(x, t) = \frac{M}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) \quad (1.21)$$

donde  $D$  es el coeficiente de difusión [Ec.1.1] y  $M$  es el número de partículas suspendidas. Como podemos observar, [Ec.1.21] es una distribución Gaussiana con media  $\mu = 0$  y varianza  $\sigma^2 = 2Dt$ , que no depende de la masa de las partículas, sino sólo de su tamaño, pues  $D \propto 1/r$  donde  $r$  es el radio de la partícula.

### Desplazamiento cuadrático medio (MSD)

Dado que la descripción del movimiento de las partículas suspendidas queda determinada por la función de distribución  $\rho(x, t)$  [Ec.1.21], es decir, sobre una función que nos dice la distribución temporal de los valores numéricos que toma la variable aleatoria  $x$ , las cantidades medibles macroscópicamente deben estar asociadas a promedios estadísticos. Dado que las colisiones, del medio, con la partícula suspendida son en todas direcciones, el promedio estadístico del desplazamiento de éstas es cero  $\left[\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x, t)x dx = 0\right]$ . Es por ello que la cantidad medible macroscópicamente (propuesta por Einstein) es el desplazamiento cuadrático medio ( en inglés: mean square displacement o MSD)  $\left[\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x, t)x^2 dx = 0\right]$ .

Para una partícula suspendida ( $M = 1$ ) el MSD vendrá dado por:

$$\langle x^2 \rangle = 2Dt \quad (1.22)$$

y como podemos observar, es una cantidad lineal en el tiempo que es posible medir experimentalmente. Al ser una expresión lineal en el tiempo se dice que esta partícula está asociada a un proceso de difusión.<sup>4</sup> De esta manera Einstein logró caracterizar el movimiento errático de los granos de polen observados por Brown. [12]

<sup>3</sup>La solución completa a este problema se puede visualizar en el apéndice A 7.1.1.

<sup>4</sup>Si  $t^n$ , con  $n = 1$ , se dice que el proceso es de difusión lineal. Si  $n > 1$ , se dice que es un proceso superdifusivo. Si  $n < 1$ , se dice que es proceso subdifusivo.

### 1.3. Langevin y el movimiento Browniano

Gracias a los experimentos realizados por Perrín en 1909, se pudo validar la estructura de la Materia tal y como la Teoría Cinética lo planteaba. Sin embargo, el camino que tomó Einstein para la descripción del movimiento errático de las partículas suspendidas no fue el único. Langevin en el año de 1908 dentro su artículo “Sobre la Teoría del Movimiento Browniano” demostró que podía obtener el resultado que Einstein había encontrado empleando un nuevo formalismo (que hoy en día conocemos como cálculo estocástico) en el que el efecto total de las colisiones sobre la partícula suspendida se sustituye por una fuerza aleatoria, de tal manera que se desprecia el efecto individual de cada colisión.

La propuesta se basa en el hecho de que si la dinámica clásica de cualquier partícula es caracterizada por las ecuaciones de Newton, entonces, la dinámica de una partícula suspendida también tendría que serlo. Entonces, ¿Cuáles son las fuerzas que actúan sobre una partícula suspendida?

Veamos, de la Hidrodinámica clásica se sabe que una partícula moviéndose dentro de un fluido siente una fuerza de arrastre  $\vec{F}_v$  que analíticamente viene dada por la ley de Stokes, entonces, una partícula suspendida en un fluido debe sentir esta fuerza. Por otro lado, al considerar la existencia de moléculas, la partícula suspendida siente una fuerza  $\vec{\xi}(t)$  asociada a todas aquellas colisiones que la misma tiene con aquellas. Entonces, al ser estas las únicas fuerzas que la partícula suspendida siente, su ecuación de movimiento (en una dimensión) es:

$$ma_x = -\gamma v_x + \xi_x(t) \quad (1.23)$$

donde  $m$  es la masa de la partícula suspendida,  $\gamma = 6\pi\mu r$ ,  $\mu$  es la viscosidad del medio, y  $r$  es el radio de la partícula.

La manera en que Langevin resolvió la ecuación dinámica [Ec.1.23] fue la siguiente, al multiplicar por  $x$  a ambos lados de la igualdad tenemos que:

$$m(x\ddot{x}) = -\gamma(x\dot{x}) + x\xi_x(t) \quad (1.24)$$

Por otro lado, es posible demostrar las siguientes igualdades:

$$\frac{dx^2}{dt} = 2x\dot{x} \Rightarrow x\dot{x} = \frac{1}{2} \frac{dx^2}{dt} \quad (1.25)$$

$$\frac{d^2x^2}{dt^2} = 2[x\ddot{x} + \dot{x}^2] \Rightarrow x\ddot{x} = \frac{1}{2} \frac{d^2x^2}{dt^2} - \dot{x}^2 \quad (1.26)$$

Entonces al sustituir estas últimas expresiones en [Ec.1.24] ésta se transforma en:

$$m \left[ \frac{1}{2} \frac{d^2 x^2}{dt^2} - \dot{x}^2 \right] = -\frac{1}{2} \gamma \frac{dx^2}{dt} + x \xi_x \quad (1.27)$$

Dado que la partícula suspendida está en equilibrio con el medio en donde está sumergida ésta debe satisfacer el Teorema de equipartición de Energía que establece que el promedio de energía cinética de la partícula en cada dirección debe satisfacer la relación:

$$\left\langle \frac{1}{2} m \dot{x}^2 \right\rangle = \frac{k_B T}{2} \quad (1.28)$$

donde  $k_B$  es la constante de Boltzmann y  $T$  la temperatura del medio.

Ya que podemos formar un ensamble de partículas brownianas sujetas a las mismas condiciones iniciales, entonces es posible calcular las cantidades medibles macroscópicas mediante promedios estadísticos espaciales  $\langle \cdot \rangle$ .

Tomando el promedio estadístico a la expresión [Ec.1.27] tenemos que:

$$\frac{1}{2} m \left\langle \frac{d^2 x^2}{dt^2} \right\rangle - m \langle \dot{x}^2 \rangle = -\frac{1}{2} \gamma \left\langle \frac{dx^2}{dt} \right\rangle + \langle x \xi_x \rangle \quad (1.29)$$

Al emplear el Teorema de Equipartición de energía dado por [Ec.1.28] y considerar que el término  $\langle x \xi_x \rangle = 0$  se desvanece debido a que la fuerza estocástica  $\xi_x$  y la variable aleatoria  $x$  no están correlacionados entre sí <sup>5</sup>, podemos verificar que la [Ec.1.29] se transforma en:

$$\frac{1}{2} m \left\langle \frac{d^2 x^2}{dt^2} \right\rangle - k_B T = -\frac{1}{2} \gamma \left\langle \frac{dx^2}{dt} \right\rangle \quad (1.30)$$

Ahora, dado que los operadores diferenciales temporales conmutan con los promedios estadísticos espaciales, la expresión anterior se reescribe como:

$$\frac{1}{2} m \frac{d^2}{dt^2} \langle x^2 \rangle - k_B T = -\frac{1}{2} \gamma \frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle \quad (1.31)$$

siendo esta una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden cuya solución <sup>6</sup> viene dada por:

$$\langle x^2(t) \rangle = A e^{-\frac{\gamma t}{m}} + \frac{2k_B T}{\gamma} t + B \quad (1.32)$$

---

<sup>5</sup>Para más detalles, véase [9] pag.14

<sup>6</sup>para más detalles de la solución véase el apéndice 7.1.2

donde  $A$  y  $B$  son constantes que quedan determinadas por condiciones iniciales.

Para que sea válida nuestra suposición, de que el sistema está en equilibrio termodinámico, tomamos el límite a tiempos largos del resultado [Ec.1.32]. Podemos verificar que se obtiene:

$$\langle x^2(t) \rangle_{t \gg m/\gamma} = \frac{2k_B T}{\gamma} t \quad (1.33)$$

un proceso de difusión lineal en el tiempo donde al comparar con [Ec.1.22] reconocemos que:

$$D = \frac{k_B T}{\gamma} \quad (1.34)$$

es el coeficiente de Difusión de una partícula suspendida.

Por lo tanto, ambos enfoques, que en esencia son totalmente distintos, nos dan como resultado el MSD lineal en el tiempo (cuando la partícula suspendida está en equilibrio con el sistema). Entonces, la relevancia de Langevin en el estudio del movimiento Browniano fue la de introducir el concepto de Fuerzas estocásticas (que sentaría las bases del Cálculo estocástico) y el uso de la ley de equipartición de la energía para caracterizarlo. Es importante decir que el procedimiento que él desarrolló para resolver la ecuación [Ec.1.23] no es el utilizado en el Formalismo que hoy lleva su nombre. En el capítulo 2 mostramos la manera en que hoy en día se trabajan con las ecuaciones diferenciales estocásticas.

## Capítulo 2

# Formalismo de los procesos estocásticos

Las ideas que llevaron a los resultados obtenidos por Einstein y Langevin (al caracterizar la dinámica de una partícula Browniana) posteriormente se generalizaron matemáticamente para poder estudiar sistemas sujetos a procesos estocásticos más complejos, no sólo en fenómenos de la Física, sino también de la Economía, la Medicina, la Biología, y otras ciencias. Entre los personajes más importantes en el desarrollo de lo que hoy conocemos como procesos estocásticos y teoría de probabilidades, destacan los aportes realizados por M.Smoluchowski, A.Markov, S.Chapman, N.Wiener, A.Kolmogorov, entre muchos otros [25], sin embargo, dado que las ideas revolucionarias que son base de los formalismos actuales (que describiremos en este capítulo) fueron las de Einstein y las de Langevin, no daremos detalles acerca de las contribuciones de los personajes antes citados.

Actualmente hay dos maneras de estudiar un proceso estocástico: por un lado tenemos el formalismo de Langevin en el que se resuelven ecuaciones diferenciales estocásticas para obtener cantidades estadísticas asociadas a observables macroscópicas, mientras que por el otro lado tenemos el formalismo de Fokker-Planck que, como veremos más adelante, tiene como objetivo obtener las cantidades medibles macroscópicas a partir de la función de distribución de probabilidad (PDF) que se rige por la Ecuación de Fokker-Planck.

Es importante señalar que ambos formalismos son compatibles, pues, existe una conexión entre ellos que será de mucha importancia posteriormente, pues, la emplearemos para obtener la ecuación de Smoluchowski para nuestro modelo de ABP's sobre geometrías planas.

## 2.1. Formalismo de Langevin

Como mencionamos en la introducción del este capítulo, en el formalismo de Langevin se resuelven las ecuaciones dinámicas de Langevin, entonces, para mostrar los detalles del método empleado en este formalismo, tomaremos como ejemplo la dinámica de una partícula pasiva Browniana libre (en 1D), cuya ecuación viene dada de nuevo por [Ec.1.23], reescribiéndola tenemos:

$$m\dot{v} = -\gamma v + \xi(t) \quad (2.1)$$

donde

$$\dot{x} = v \quad (2.2)$$

Para caracterizar el efecto de las fluctuaciones térmicas del medio es necesario caracterizar la función de ruido  $\xi(t)$ , cuyas propiedades para el caso de un ruido blanco son:

$$\langle \xi(t_1) \rangle = 0 \quad (2.3)$$

$$\langle \xi(t_1)\xi(t_2) \rangle = \lambda\delta(t_2 - t_1) \quad (2.4)$$

donde  $\lambda$  representa la magnitud del ruido gaussiano. [Ec.2.3] representa la isotropía de las colisiones de las partículas del medio con nuestra partícula Browniana, mientras que [Ec.2.4] nos indica que el proceso estocástico no tiene memoria, es decir, que el proceso no es causal, sino que es estadísticamente independiente.

Dado que caracterizar el sistema significa calcular el MSD, entonces volveremos a calcularlo. Ahora emplearemos el método que actualmente se utiliza para la solución de este tipo de problemas.

Dado que [Ec.2.1] es una ecuación inhomogénea, cuya solución viene dada de la suma de la solución homogénea y de la solución particular<sup>1</sup>, podemos verificar que bajo las condición inicial  $v(0) = v_0$  la solución es:

$$v(t) = v_0 e^{-\frac{\gamma}{m}t} + \frac{1}{m} \int_0^t e^{-\frac{\gamma}{m}(t-t')} \xi(t') dt' \quad (2.5)$$

donde podemos apreciar que el primer término de la derecha representa un decaimiento en  $1/e$  de la velocidad inicial  $v_0$  de la partícula Browniana al

---

<sup>1</sup>para ver demostración véase Apéndice 7.1.3

tiempo de relajación  $t_M = m/\gamma$ . Éste resultado implica que la velocidad de la partícula a tiempos largos es independiente de su valor inicial, por lo que entonces podría considerarse  $v_0$  prácticamente cero en todo momento del proceso.

Para obtener la posición  $x$  al tiempo  $t$  es necesario integrar de nuevo con respecto a  $t$  de manera directa. Podemos verificar que bajo la condición inicial  $x(0) = x_0$ , la expresión para la posición es:

$$x(t) = x_0 + \frac{mv_0}{\gamma} \left(1 - e^{-\frac{\gamma}{m}t}\right) + \frac{1}{\gamma} \int_0^t \left(1 - e^{-\frac{\gamma}{m}(t-t')}\right) \xi(t') dt' \quad (2.6)$$

cuya demostración también podemos ver en el Apéndice 7.1.3.

Para poder obtener el MSD emplearemos el hecho de que:

$$x(t) - x_0 = \int_0^t v(t_1) dt_1 \quad (2.7)$$

de tal manera que entonces al elevar al cuadrado tenemos una expresión de la forma:

$$(x(t) - x_0)^2 = \left[ \int_0^t v(t_1) dt_1 \right] \left[ \int_0^t v(t_2) dt_2 \right] = \int_0^t \int_0^t v(t_1)v(t_2) dt_1 dt_2 \quad (2.8)$$

que al tomar promedio estadístico, por ambos lados, se reduce a:

$$\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle = \int_0^t \int_0^t \langle v(t_1)v(t_2) \rangle dt_1 dt_2 \quad (2.9)$$

que es una integral donde está implícita la correlación de velocidades para dos tiempos distintos  $t_1$  y  $t_2$  que viene dada por <sup>2</sup> :

$$\langle v(t_1)v(t_2) \rangle = v_0^2 e^{-\frac{\gamma}{m}(t_1+t_2)} + \frac{\lambda}{2m\gamma} \left[ e^{-\frac{\gamma}{m}|t_1-t_2|} - e^{-\frac{\gamma}{m}(t_1+t_2)} \right] \quad (2.10)$$

---

<sup>2</sup>para más detalles véase [34]

sustituyendo [Ec.2.10] en [Ec.2.9] obtenemos:

$$\begin{aligned}
\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle &= \int_0^t \int_0^t v_0^2 e^{-\frac{\gamma}{m}(t_1+t_2)} dt_1 dt_2 \\
&\quad + \int_0^t \int_0^t \frac{\lambda}{2m\gamma} \left[ e^{-\frac{\gamma}{m}|t_1-t_2|} - e^{-\frac{\gamma}{m}(t_1+t_2)} \right] dt_1 dt_2 \\
&= \left[ v_0^2 - \frac{\lambda}{2m\gamma} \right] \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{\gamma}{m}(t_1+t_2)} dt_1 dt_2 \\
&\quad + \frac{\lambda}{2m\gamma} \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{\gamma}{m}|t_1-t_2|} dt_1 dt_2 \\
&= \left[ v_0^2 - \frac{\lambda}{2m\gamma} \right] \left[ \int_0^t e^{-\frac{\gamma}{m}t_1} dt_1 \right]^2 + \frac{\lambda}{m\gamma} \int_0^t e^{-\frac{\gamma}{m}t_1} \int_0^{t_1} e^{\frac{\gamma}{m}t_2} dt_2 dt_1
\end{aligned} \tag{2.11}$$

donde hemos empleado el hecho de que las variables de integración son mudas, y además, de la definición de valor absoluto para poder cambiar los límites de integración.

Al realizar las integrales podemos verificar que el MSD viene dado por:

$$\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle = \frac{m^2}{\gamma^2} \left( v_0^2 - \frac{\lambda}{2m\gamma} \right) \left( 1 - e^{-\frac{\gamma}{m}t} \right)^2 + \frac{\lambda}{\gamma^2} \left[ t - \frac{m}{\gamma} \left( 1 - e^{-\frac{\gamma}{m}t} \right) \right] \tag{2.12}$$

y por lo tanto al tomar el límite de tiempos largos, i.e.,  $t \rightarrow \infty$  resulta que:

$$\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle_{t \rightarrow \infty} = \frac{\lambda}{\gamma^2} t \tag{2.13}$$

donde el término lineal domina la expresión a tiempos largos.

Al comparar este último resultado con el obtenido en [Ec.1.33] podemos darnos cuenta que si ambos son equivalentes se debe cumplir que la magnitud del proceso estocástico Gaussiano debe ser:

$$\lambda = 2\gamma k_B T \tag{2.14}$$

Este resultado engloba de manera particular al Teorema de Fluctuación-Disipación, teorema que relaciona la magnitud de las fluctuaciones microscópicas en el equilibrio (que la partícula Browniana siente debido a las colisiones del medio) con las propiedades macroscópicas de disipación del medio donde se desplaza.

Sin embargo, la expresión [Ec.2.12] no sólo nos da información de la partícula Browniana a tiempos largos, si no que, también nos permite analizar lo que ocurre al inicio del proceso, es decir, lo que ocurre tiempos muy cortos cercanos a cuando la partícula partió de sus condiciones iniciales  $(x_0, v_0)$ .

Al hacer la expansión de las exponenciales de [Ec.2.12] en series de Taylor alrededor de tiempos que cumplen la condición

$$t \ll \frac{m}{\gamma}$$

obtenemos

$$\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle_{t \ll m/\gamma} = v_0^2 t^2 \quad (2.15)$$

lo que nos da indicio del por qué a tiempos largos, el MSD no depende de  $m$ , sino solo de la temperatura  $T$  del medio, de su viscosidad  $\mu$ , y del radio de la partícula  $r$ .

Veamos, si tenemos una partícula puntual en movimiento rectilíneo uniforme (MRU) su posición a todo tiempo viene dada por:

$$x(t) = x_0 + v_0 t \quad \Rightarrow \quad (x(t) - x_0) = v_0^2 t^2 \quad (2.16)$$

una expresión análoga a [Ec.2.15], entonces, haciendo uso de este resultado podemos observar que a tiempos cortos la partícula Browniana realiza un movimiento balístico análogo al movimiento de una partícula libre en MRU, para posteriormente pasar puramente al proceso difusivo, donde la masa  $m$  de la partícula Browniana no tiene relevancia. Es curioso, pues [Ec.2.16] nos indica que la aceleración de la partícula libre es nula, mientras que para obtener [Ec.2.15], es necesario resolver la [Ec.2.1] y la [Ec.2.2], sin depreciar la aceleración del sistema. Más adelante veremos que para obtener exclusivamente el proceso difusivo a partir del Formalismo de Langevin basta con depreciar los efectos de inercia de las ecuaciones dinámicas de la partícula Browniana, todo esto bajo el argumento de que las fuerzas de fricción son muchos ordenes mayores a las fuerzas inerciales, pues, la masa de las partículas brownianas es muy pequeña.

Dado que la ecuación [Ec.2.1] también contiene información sobre la velocidad de la partícula, introduciremos una nueva cantidad medible experimentalmente, la rapidez cuadrática media (MSS, Mean-Square Speed)  $\langle v(t)^2 \rangle$ , que en nuestro caso particular, al emplear la expresión [Ec.2.10](haciendo que  $t_1 = t_2 = t \rightarrow \infty$ ), tenemos que viene dado por:

$$\langle v(t)^2 \rangle_{t \rightarrow \infty} = \frac{\lambda}{2m\gamma} = \frac{k_B T}{m} \quad (2.17)$$

donde hemos empleado [Ec.2.14]. Este resultado es familiar, pues de el recuperamos el Teorema de Equipartición de la Energía  $m\langle v^2 \rangle / 2 = k_B T / 2$ .

## 2.2. Formalismo de Fokker Planck

A pesar de que hemos mostrado la capacidad del formalismo de Langevin para caracterizar un sistema estocástico (en particular, un sistema de partículas Brownianas pasivas) a veces es necesario abordar el problema desde el punto de vista probabilista, es decir, a partir de la función de densidad de probabilidad (PDF) (asociada a las variables aleatorias del sistema) que es regida por la ecuación de Fokker-Planck.

Para poder obtener dicha ecuación partiremos de un sistema de  $n$  ecuaciones estocásticas de la forma:<sup>3</sup>

$$\frac{dx_i}{dt} = v_i(\mathbf{x}(t), t) + \sum_{j=1}^n w_{ij}(\mathbf{x}(t), t) \xi_j(t) \quad (2.18)$$

donde el primer miembro de lado derecho de la ecuación recibe el nombre de término de arrastre, mientras que el segundo miembro recibe el nombre de término difusivo. Veremos más adelante las razones de sus nombres.

Al ser  $\{x_1(t), x_2(t), x_3(t), \dots, x_n(t)\}$  un conjunto de variables aleatorias, entonces el sistema debe tener asociada una PDF que nos indique la distribución de valores para el vector  $\mathbf{x}(t) = (x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t))$  a todo tiempo  $t$ . La ecuación diferencial parcial que nos indica la evolución temporal de la función de densidad de probabilidad  $\rho(x_1, x_2, \dots, x_n, t)$  asociada a las variables aleatorias del vector  $\mathbf{x}(t)$  recibe el nombre de la ecuación de Fokker-Planck.

Ésta ecuación, en nuestro caso, la obtendremos al emplear el Método de Novikov, ya que, este método es el que nos permitirá obtener posteriormente la ecuación de Smoluchowski<sup>4</sup> para nuestro modelo de ABP's moviéndose sobre curvas planas. Es de importancia aclarar que no es necesario tener conocimientos específicos sobre integrales estocásticas en el esquema de Itô, o de Stratonovich, pero haremos hincapié en que el término estocástico,  $\xi_i(t)$ , que aparece en el sistema de ecuaciones [Ec.2.18], es considerado en el esquema de Stratonovich, ya que, para emplear el Método de Novikov es necesario considerarlo en ese esquema.

---

<sup>3</sup>Toda ecuación diferencial estocástica podemos llevarla a la forma [Ec.2.18], pues es una generalización a una ecuación del tipo dada por la [Ec.2.1] o [Ec.2.2]

<sup>4</sup>La ecuación de Smoluchowski es la ecuación particular de Fokker-Planck para la PDF en posición.

## Novikov's Method

Sea, de nuevo, el sistema de ecuaciones diferenciales estocásticas en el esquema de Stratonovich:

$$\frac{dx_i}{dt} = v_i(\mathbf{x}(t), t) + \sum_{j=1}^n w_{ij}(\mathbf{x}(t), t)\xi_j(t) \quad (2.19)$$

donde las propiedades del ruido son las de un proceso blanco gaussiano, es decir:

$$\langle \xi_i(t) \rangle = 0 \quad (2.20)$$

$$\langle \xi_i(t)\xi_j(t') \rangle = 2B_j\delta_{ij}\delta(t-t') \quad (2.21)$$

donde  $B_j$  es una constante.

La PDF asociada a las variables del vector  $\mathbf{x}(t)$  por definición es de la forma:

$$P(\mathbf{x}, t) = \langle \delta(\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}) \rangle \quad (2.22)$$

que al derivar con respecto al tiempo toma la forma:<sup>5</sup>

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\mathbf{x}, t)}{\partial t} &= - \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \langle \delta(\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}) \frac{dx_i}{dt} \rangle \\ &= - \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \langle \delta(\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}) v_i(\mathbf{x}(t), t) \rangle \\ &\quad - \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \langle \delta(\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}) w_{ij}(\mathbf{x}(t), t) \xi_j(t) \rangle \end{aligned} \quad (2.23)$$

Ahora, usando las propiedades:

$$\begin{aligned} f(x(t))\delta(x(t) - x) &= f(x)\delta(x(t) - x) \\ \langle f(x(t))\delta(x(t) - x) \rangle &= f(x)\langle \delta(x(t) - x) \rangle = f(x)P(x, t) \end{aligned}$$

podemos verificar que la expresión toma la forma:

$$\frac{\partial P(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = - \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} [v_i(\mathbf{x}, t)P(\mathbf{x}, t)] - \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} w_{ij}(\mathbf{x}, t) \langle \delta(\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}) \xi_j(t) \rangle \quad (2.24)$$

---

<sup>5</sup>Recordemos que en  $P(\mathbf{x}, t)$ ,  $\mathbf{x}$  y  $t$  son independientes

Para trabajar el segundo término de esta última expresión emplearemos el Teorema de Novikov (cuando  $\langle \xi_j(t) \rangle = 0$ ) que establece:

$$\langle \delta(\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}) \xi_j(t) \rangle = \int_0^\infty dt' \sum_{k=1}^n \left\langle \frac{\partial \delta(\mathbf{x}(t) - \mathbf{x})}{\partial \xi_k(t')} \right\rangle \langle \xi_k(t) \xi_j(t') \rangle \quad (2.25)$$

Entonces, introduciendo [Ec.2.21] en [Ec.2.25] podemos fácilmente demostrar que:

$$\langle \delta(\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}) \xi_j(t) \rangle = 2B_j \sum_{m=1}^n \left\langle \frac{\partial \delta(\mathbf{x}(t) - \mathbf{x})}{\partial x_m(t)} \frac{\partial x_m(t)}{\partial \xi_j(t)} \right\rangle \quad (2.26)$$

donde, para calcular dicho promedio primero usamos, de nuevo, propiedades de la delta de Dirac.

Por un lado podemos verificar que<sup>6</sup>:

$$\frac{\partial \delta(\mathbf{x}(t) - \mathbf{x})}{\partial x_m(t)} = -\frac{\partial}{\partial x_m} \delta(\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}) \quad (2.27)$$

y por otro:

$$\frac{\partial x_m(t)}{\partial \xi_j(t)} = \frac{1}{2} w_{mj}(\mathbf{x}(t), t) \quad (2.28)$$

Por lo tanto, usando [Ec.2.27] y [Ec.2.28] en [Ec.2.26] podemos finalmente ver que la forma que toma el término que nos hacía falta en nuestro desarrollo de la ecuación de Fokker-Planck será:

$$\langle \delta(\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}) \xi_j(t) \rangle = -\sum_{m=1}^n B_j \frac{\partial}{\partial x_m} w_{mj}(\mathbf{x}, t) P(\mathbf{x}, t) \quad (2.29)$$

sustituyendo esta última expresión en [Ec.2.24] obtenemos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = & -\sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} [v_i(\mathbf{x}, t) P(\mathbf{x}, t)] \\ & + \sum_{i,j,m=1}^n B_j \frac{\partial}{\partial x_i} w_{ij}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial}{\partial x_m} w_{mj}(\mathbf{x}, t) P(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (2.30)$$

que es la ecuación de Fokker-Planck para un proceso descrito por [Ec.2.19]-[Ec.2.21], en el esquema de Stratonovich.

<sup>6</sup>Para más detalles véase [27] pag: 9-17

Sin embargo, es muy común que las ecuaciones dinámicas de Langevin para un sistema se encuentren en el esquema de Itô, por lo que entonces es necesario reescribir [Ec.2.30] en este esquema. La conexión entre el esquema de Stratonovich e Ito viene dada por:<sup>7</sup>

$$w_{ij}(\mathbf{x}(t), t)\xi_j^{st}(t) = \frac{1}{2}w_{ij}(\mathbf{x}(t), t)\frac{\partial w_{ij}(\mathbf{x}(t), t)}{\partial x_m} + w_{ij}(\mathbf{x}(t), t)\xi_j^{ito}(t) \quad (2.31)$$

donde, lo único que tendríamos que realizar es la sustitución del término de arrastre:

$$v_i(\mathbf{x}, t) \rightarrow v_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{2}w_{ij}(\mathbf{x}(t), t)\frac{\partial w_{ij}(\mathbf{x}(t), t)}{\partial x_m} \quad (2.32)$$

en la expresión [Ec.2.30].

Por otro lado, para el caso particular  $w_{ij}(\mathbf{x}(t), t) = w_{ij}(t)$  se cumple que:

$$w_{ij}(\mathbf{x}(t), t)\xi_j^{st}(t) = w_{ij}(\mathbf{x}(t), t)\xi_j^{ito}(t) \quad (2.33)$$

es decir, bajo dicha condición ambos esquemas son idénticos, y la ecuación de Fokker-Planck [Ec.2.30] toma la forma:

$$\frac{\partial P(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = - \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} [v_i(\mathbf{x}, t)P(\mathbf{x}, t)] + \sum_{i,j,m=1}^n B_j w_{ij}(t) w_{mj}(t) \frac{\partial^2 P(\mathbf{x}, t)}{\partial x_i \partial x_m} \quad (2.34)$$

Finalmente, si tenemos que el término difusivo cumple la condición  $w_{ij} = w_j \delta_{ij}$ , entonces [Ec.2.34] toma la forma más conocida de la ecuación de Fokker-Planck:

$$\frac{\partial P(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = - \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} [v_i(\mathbf{x}, t)P(\mathbf{x}, t)] + \sum_{i=1}^n B_i w_i^2(t) \frac{\partial^2 P(\mathbf{x}, t)}{\partial x_i^2} \quad (2.35)$$

### Ejemplo: Partícula pasiva Browniana libre

Dado que ahora sabemos la expresión general para la ecuación de Fokker-Planck (en coordenadas rectangulares), de nuevo, tomaremos el caso particular de un modelo de partícula pasiva Browniana libre, cuya dinámica se describe mediante el sistema de ecuaciones de Langevin:

$$\dot{x} = v \quad (2.36)$$

---

<sup>7</sup>véase Apéndice 7.4

$$\dot{v} = -\beta v + \frac{F(t)}{m} \quad (2.37)$$

donde  $\beta = \frac{\gamma}{m}$ . Además, la fuerza  $F(t)$  se considera como un proceso Gaussiano con las propiedades estandarizadas  $\langle F(t)F(t') \rangle = 2D\delta(t-t')$  y  $\langle F(t) \rangle = 0$ , donde  $D = k_B T \gamma = D_B \gamma^2$  es el coeficiente de difusión del sistema.

Al comparar nuestro sistema de ecuaciones de Langevin [Ec.2.36]-[Ec.2.37] con las expresiones generales [Ec.2.19] y [Ec.2.21], donde  $\mathbf{x} = \{x, v\}$ , podemos verificar que la respectiva ecuación de Fokker-Planck para la PDF,  $P(x, v, t)$ , viene dada por:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial[vP]}{\partial x} + \beta \frac{\partial[vP]}{\partial v} + \frac{D}{m^2} \frac{\partial^2 P}{\partial v^2} \quad (2.38)$$

cuya solución está sujeta a la condición inicial:

$$P(x, v, 0) = \delta(x - x_0)\delta(v - v_0) \quad (2.39)$$

Para tratar matemáticamente la ecuación [Ec.2.38] la transformaremos al doble espacio de Fourier en posición y velocidad, donde la bi-transformación de Fourier se define como:

$$\tilde{P}(q, u, t) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} P(x, v, t) e^{-ixq} e^{-ivu} dx dv \quad (2.40)$$

Entonces, la ecuación de Fokker-Planck en el espacio dual de Fourier será:

$$\frac{\partial \tilde{P}}{\partial t} + (\beta u - q) \frac{\partial \tilde{P}}{\partial u} = -\frac{D}{m^2} u^2 \tilde{P} \quad (2.41)$$

Ahora, si adimensionalizamos la ecuación [Ec.2.41] usando las definiciones  $\tau = \frac{t}{\tau_M} = \beta t$ ,  $w = uv_{th}$  y  $\alpha = \frac{qv_{th}}{\beta}$ , donde  $\tau_M = \frac{1}{\beta} = \frac{m}{R_v}$  y  $v_{th} = \sqrt{\frac{k_B T}{m}}$ , ésta toma la forma:

$$\frac{\partial \tilde{P}}{\partial \tau} + (w - \alpha) \frac{\partial \tilde{P}}{\partial w} = -w^2 \tilde{P} \quad (2.42)$$

y cuya solución se obtiene al emplear el método de las características y es dada por:

$$\tilde{P}(\alpha, w, \tau) = f((w - \alpha) e^{-\tau}) e^{-\frac{1}{2}(w-\alpha)^2 - 2\alpha(w-\alpha) - \alpha^2 \tau} \quad (2.43)$$

donde  $f((w - \alpha)e^{-\tau})$  es una función particular que queda determinada al aplicar la condición inicial [Ec.2.39] en el espacio de Fourier.

Tomaremos el caso particular  $x_0 = v_0 = 0$ , con el fin simplificar la matemática involucrada.

Podemos verificar que la solución particular a nuestro problema viene dada por:

$$\tilde{P}(\alpha, w, \tau) = \frac{1}{(2\pi)^2} e^{-\frac{1}{2}(w-\alpha)^2(1-e^{-2\tau})-2\alpha(w-\alpha)(1-e^{-\tau})-\alpha^2\tau} \quad (2.44)$$

donde hemos transformado la condición inicial [Ec.2.39] al bi-espacio de Fourier usando la definición [Ec.2.40].

Recordemos que hemos pasado de variables espaciales  $\{x, v\}$  a variables de Fourier  $\{q, u\}$ , y después a variables de Fourier adimensionales  $\{\alpha, w\}$  que están asociadas a un nuevo conjunto de variables adimensionales espaciales  $\{\bar{x}, \bar{v}\}$  dadas por  $\bar{x} = \frac{x\beta}{v_{th}}$  ;  $\bar{v} = \frac{v}{v_{th}}$ , de tal manera que al reescribir la doble transformada de Fourier 2.40 en estas nuevas variables adimensionales podemos comprobar que su respectiva transformación inversa viene dada por:

$$P(\bar{x}, \bar{v}, t) = \frac{\beta}{v_{th}^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{P}(\alpha, w, t) e^{i\alpha\bar{x}} e^{iw\bar{v}} d\alpha d\omega \quad (2.45)$$

Al introducir [Ec.2.44] en esta última expresión tenemos que:

$$P = \frac{\beta}{(2\pi)^2 v_{th}^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}(w-\alpha)^2(1-e^{-2\tau})-2\alpha(w-\alpha)(1-e^{-\tau})-\alpha^2\tau} d\alpha d\omega \quad (2.46)$$

Ahora, realizando la integral doble (donde hay que completar el cuadrado perfecto en el exponente y ocupar integrales Gaussianas) se puede verificar finalmente que la PDF del espacio fásico  $\{x, v\}$  para una partícula Browniana libre viene dada por:

$$P(x, v, t) = \frac{\beta}{2\pi v_{th}^2 \sqrt{\det \sigma}} e^{[-\frac{1}{2}[\sigma_{xx}]^{-1}\bar{v}^2 - [\sigma_{xv}]^{-1}\bar{x}\bar{v} - \frac{1}{2}[\sigma_{vv}]^{-1}\bar{x}^2]} \quad (2.47)$$

donde

$$\sigma_{xx} = (2\tau - e^{-2\tau} + 4e^{-\tau} - 3) \quad ; \quad \sigma_{vv} = (1 - e^{-2\tau}) \quad ; \quad \sigma_{xv} = (1 - e^{-\tau})^2$$

$$[\sigma_{xx}]^{-1} = \frac{\sigma_{vv}}{\det \sigma} \quad ; \quad [\sigma_{vv}]^{-1} = \frac{\sigma_{xx}}{\det \sigma} \quad ; \quad [\sigma_{xv}]^{-1} = -\frac{\sigma_{xv}}{\det \sigma}$$

$$\det \sigma = \sigma_{xx}\sigma_{vv} - \sigma_{xv}^2$$

La [Ec.2.47] nos indica la distribución de los valores numéricos que toman las variables aleatorias  $\{x, v\}$  a cada tiempo  $t$ , dado que su dinámica es descrita por las ecuaciones de Langevin [Ec.2.36] y [Ec.2.37].

Es importante mencionar que a pesar de no haber considerado el caso general para las condiciones iniciales  $x_0, v_0$ , hemos expuesto de manera esquemática el método que emplearemos más adelante para la obtención de la distribución de velocidades de materia activa no interactiva. La solución general la podemos observar en el libro de Risken [34] pag.238-240.

### Distribución de posiciones

Dado que estamos interesados en verificar que [Ec.2.47] describa de manera correcta el MSD de nuestro modelo de partículas libres pasivas, primero necesitamos obtener la distribución  $P(x, t)$ , es decir, la distribución marginal en  $x$ ,  $P(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} P(x, v, t) dv$ . Podemos comprobar que esta distribución viene dada por:

$$P(x, t) = \frac{1}{v_{th}} \sqrt{\frac{\beta^2}{2\pi\sigma_{xx}}} \exp\left[-\frac{\beta^2}{2v_{th}^2\sigma_{xx}}x^2\right] \quad (2.48)$$

donde  $\sigma_{xx} = (2\beta t - e^{-2\beta t} + 4e^{-\beta t} - 3)$ .

En el limite para tiempos largos se cumple:

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D_B t}} \exp\left[-\frac{x^2}{4D_B t}\right] \quad (2.49)$$

que no es más que la PDF que obtuvo A. Einstein a partir de su analogía del movimiento Browniano con la difusión de un soluto en un solvente. Recordemos que  $D_B = \frac{k_B T}{\gamma}$  es el coeficiente de difusión traslacional de la partícula libre pasiva. A partir de [Ec.2.49] podemos, de nuevo, verificar que el MSD a tiempos largos viene dado por:

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^{\infty} P(x, t) x^2 dx = 2D_B t \quad (2.50)$$

Por lo tanto, con el formalismo de Fokker-Planck fue posible caracterizar de nuevo nuestro sistema de partículas pasivas brownianas libres, sin embargo, obsérvese que la ecuación de difusión de Einstein [Ec.1.17] no tiene la misma forma que la ecuación de Fokker-Planck [Ec.2.38], y aún así éstas nos arrojan los mismos resultados para la PDF en posición para tiempos largos. En la siguiente sección abordaremos el caso sobreamortiguado tanto en las ecuaciones de Langevin, como en la ecuación de Fokker-Planck, para dar la explicación del por qué ocurre esto.

## Distribución de velocidades

En el formalismo de Langevin introducimos el MSS (Mean Square Speed), cuyo resultado particular [Ec.2.17] arrojó que nuestro sistema de partículas libres, en el estado estacionario, es consistente con el Teorema de equipartición de la energía, todo esto sin hacer referencia, hasta el momento, de la forma que tiene la PDF de velocidades de nuestro sistema. Entonces, al realizar la marginal en velocidades  $v$  ( $P(v, t) = \int_{-\infty}^{\infty} P(x, v, t) dx$ ) de nuestra distribución [Ec.2.47] podemos verificar que la distribución de velocidades de nuestro sistema viene dado por:

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

tal que en el límite  $t \rightarrow \infty$  toma la forma:

$$P(v) = \sqrt{\frac{\beta m^2}{2\pi D}} \exp\left[-\frac{\beta m^2}{2D} (v)^2\right] \quad (2.52)$$

Esta distribución coincide con la distribución de velocidades de Maxwell-Boltzmann, distribución que nos indica físicamente que la dirección de movimiento de la partícula no tiene preferencia. Este resultado es relevante, pues, es la distribución de velocidades que siguen las moléculas de un gas ideal en el equilibrio.

Al usar [Ec.2.52] para obtener el MSS a tiempos largos tenemos que:

$$\langle v^2 \rangle = \int_0^{\infty} P(v) v^2 dv = \frac{D}{\beta m^2} = \frac{k_B T}{m} \quad (2.53)$$

y por lo tanto se obtiene, de nuevo, la equipartición de la energía  $\frac{1}{2}m\langle v^2 \rangle = \frac{1}{2}k_B T$ .

## 2.3. Límite sobreamortiguado

Finalmente queda una pregunta en el aire, ¿Por qué el MSD a tiempos largos que se obtiene de la ecuación de difusión de Einstein, y de la ecuación de Fokker-Planck, es el mismo, si dichas ecuaciones son en esencia distintas?, bueno, veamos, a tiempos cortos pudimos demostrar que el MSD para una partícula pasiva libre viene dada por [Ec.2.15]:

$$\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle_{short} = v_0 t^2 \quad (2.54)$$

que físicamente implica que al inicio del proceso estocástico la partícula se desplaza como si fuese un cuerpo con movimiento rectilíneo uniforme, es decir, como si el sistema ignorara la presencia de las fuerzas aleatorias y de arrastre del medio por un tiempo  $\tau_M$  ( $\tau_M = \frac{1}{\beta}$ ). A  $\tau_M$  se le denomina el tiempo de relajación del sistema y se refiere, por lo tanto, al tiempo que tarda la partícula en estar completamente en movimiento aleatorio. A esta etapa del proceso se le denomina el régimen balístico, pues, como hemos dicho, la partícula desprecia las fuerzas aleatorias y del medio, tal y como lo haría una bala.

Una vez transcurrido éste tiempo de relajación  $\tau_M$ , la partícula queda sujeta solamente a las fuerzas estocásticas, y las de arrastre del medio, pues, las partículas Brownianas al ser micrométricas y de masa muy pequeña, a partir de un análisis de fuerzas, resulta que las fuerzas viscosas del medio son muchos ordenes mayores a las fuerzas inerciales ( $\gamma \gg m$ ). Por lo tanto las partículas pierden la información del movimiento newtoniano, y se rigen por las fuerzas de viscosidad y aleatorias después de haber realizado su régimen balístico, es decir, las partículas Brownianas después del tiempo de relajación  $\tau_M$  se desplazan solo debido a la oposición del medio a fluir dado que éstas están siendo colisionadas por las moléculas del mismo. A esta etapa del proceso se le denomina régimen difusivo, y por lo tanto, si estamos interesado exclusivamente en la información del sistema en este régimen, al tomar el límite  $\gamma \gg m$ , diremos que el sistema estará en el límite sobreamortiguado.

Al considerar la condición  $\gamma \gg m$  en la ecuación de Langevin de partícula Browniana libre [Ec.2.37] tenemos que:

$$v = \frac{1}{\gamma} F(t) \quad (2.55)$$

cuya solución viene dada por:

$$x(t) - x_0 = \frac{1}{\gamma} \int_0^t F(t') dt' \quad (2.56)$$

Entonces, es fácil corroborar que el MSD en este límite será:

$$\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle = \frac{1}{\gamma} \int_0^t \int_0^t \langle F(t') F(t'') \rangle dt' dt'' = 2D_B t \quad (2.57)$$

Por lo tanto, el régimen difusivo de una partícula Browniana ( $\gamma \gg m$ ) es descrito mediante la ecuación de Langevin [Ec.2.55].

Ahora demostraremos que bajo las mismas condiciones en la ecuación de Fokker-Planck [Ec.2.38] podemos recuperar la ecuación de Difusión de Einstein que describe perfectamente el MSD a tiempos largos. Es importante

destacar que podemos obtener directamente la ecuación de Einstein al tomar directamente la ecuación de Langevin sobrearmortiguada [Ec.2.55] y sustituir los coeficientes en [Ec.2.35], sin embargo, nosotros lo demostraremos a partir de una solución en serie de eigenvectores del operador de Laplace  $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$  que posteriormente generalizaremos para abordar sistemas donde las fuerzas inerciales no sean totalmente nulas, es decir, sistemas donde la inercia, traslacional, y rotacional, si contribuye a tiempos largos.

Tomemos de nuevo la ecuación de Fokker-Planck para partículas pasivas libres:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -v \frac{\partial P}{\partial x} + \beta \frac{\partial [vP]}{\partial v} + \frac{D}{m^2} \frac{\partial^2 P}{\partial v^2} \quad (2.58)$$

al proponer que:

$$P(x, v, t) = \Psi_0(v) \sum_{n=0}^{\infty} p_n(x, t) \Psi_n(v) \quad (2.59)$$

sea solución a [Ec.2.58], donde:

$$\Psi_n(v) = H_n \left( \frac{v}{\sqrt{2}v_{th}} \right) \frac{\exp \left[ -\frac{1}{4} \left( \frac{v}{v_{th}} \right)^2 \right]}{\sqrt{n! 2^n v_{th} \sqrt{2\pi}}} \quad (2.60)$$

$$v_{th} = \sqrt{\frac{D}{mR_v}} = \sqrt{\frac{k_B T}{m}} \quad (2.61)$$

con  $H_m(\frac{v}{\sqrt{2}v_{th}})$  el n-ésimo polinomio de Hermite, entonces, podemos verificar que la ecuación para los coeficientes  $p_n$  vendrá dada por:

$$\frac{\partial p_m}{\partial t} = -v_{th} \left[ \sqrt{m} \frac{\partial p_{m-1}}{\partial x} + \sqrt{m+1} \frac{\partial p_{m+1}}{\partial x} \right] - m\beta p_m \quad (2.62)$$

que es un sistema de ecuaciones parciales acopladas que recibe el nombre de Ecuaciones de Hierarchy.

Dado que podemos demostrar que la distribución de posiciones viene dada por:

$$P(x, t) = p_0(x, t) \quad (2.63)$$

entonces, podemos obtener la información sobre las posiciones contenida solamente en el término  $p_0$ .

Pensando que los modos para  $n > 2$  se desprecian<sup>8</sup> y desarrollando para  $n = 1, 2$ , nuestro sistema de Hierarchy se simplifica a un sistema de solo dos

---

<sup>8</sup>Véase [34] Sec. 10.4

ecuaciones parciales acopladas dado por:

$$\frac{\partial p_0}{\partial t} = -v_{th} \left[ \frac{\partial p_1}{\partial x} \right] \quad (2.64)$$

$$\frac{\partial p_1}{\partial t} = -v_{th} \left[ \frac{\partial p_0}{\partial x} \right] - \beta p_1 \quad (2.65)$$

ahora, dado que estamos en el límite sobreamortiguado  $\beta \gg 1$ , podemos despreciar  $\frac{\partial p_1}{\partial t}$ , para entonces obtener:

$$\frac{\partial p_0}{\partial t} = \frac{v_{th}^2}{\beta} \frac{\partial^2 p_0}{\partial x^2} = D_B \frac{\partial^2 p_0}{\partial x^2} \quad (2.66)$$

que es la ecuación de difusión de Einstein. A este tipo de ecuación diferencial para la función de distribución de posiciones se le conoce como la ecuación de Smoluchowski.

## Conclusiones del capítulo

Como pudimos darnos cuenta, todos los procedimientos antes desarrollados nos llevan al mismo resultado: Caracterizar un sistema de partículas Brownianas pasivas libres. Sin embargo, para cada sistema es mejor emplear uno u otro formalismo, dependiendo de la información que se necesite obtener del sistema ha estudiar, pues aquí sólo mostramos su validez al obtener cantidades como el MSD o el MSS, pero hay otras cantidades de interés, como el MFPT, que no es posible de obtener desde el esquema de Langevin. Como veremos más adelante, nosotros estaremos yendo de un formalismo a otro para poder abordar nuestros temas de investigación.

# Capítulo 3

## Partículas Activas Brownianas

En el capítulo anterior introducimos los formalismos de Langevin y de Fokker-Planck para caracterizar el movimiento Browniano pasivo. Con ello ahora tenemos las herramientas necesarias para abordar el estudio de ABP's a través estos formalismos. Al igual que en el caso pasivo, describiremos el modelo matemático de ABP en 1D que estaremos empleando, así como también resumiremos algunos resultados ya reportados en la literatura en el estudio de este modelo. Por otro lado, es importante destacar que recientemente el interés por parte de la comunidad científica de estudiar este tipo de sistemas ha crecido enormemente debido a las posibles aplicaciones, el futuro, de las nuevas propiedades de materiales activos.

### 3.1. Modelo ABP

Dado que nos centraremos en el estudio de Materia Activa a escala Micro y Mesoscópica, sin particularizar a un ejemplo específico, plantearemos un modelo matemático simple que nos permitirá caracterizar un sin fin de sistemas reales a partir de él.

El modelo se centra en considerar al agente activo como una partícula en forma de disco plano de radio  $a$ , con masa  $m$  y o momento de inercia  $I$  ( $ma^2/2$ ), que se desplaza, y rota<sup>1</sup>, sobre un espacio plano (1D o 2D). La partícula viaja con una rapidez de autopropulsión (o de Nado)  $U(t)$  de manera que su dirección de autopropulsión está asociada al vector de orientación  $\hat{u} = \{\cos \varphi, \sin \varphi\}$  que está anclado al centro de masa de la partícula<sup>2</sup>. La partícula se sumerge en un medio caracterizado por los coeficientes de arrastre traslacional y rotacional  $R_T$  y  $R_\Omega$ , respectivamente, y por las fluctuaciones

---

<sup>1</sup>Rota alrededor del eje que cruza por su centro de masa.

<sup>2</sup>y además vive en el plano donde vive la partícula.

térmicas traslacionales y rotacionales,  $\xi_i(t)$  y  $\eta(t)$ , respectivamente, que cumplen con las condiciones de un ruido Gaussiano.<sup>3</sup>

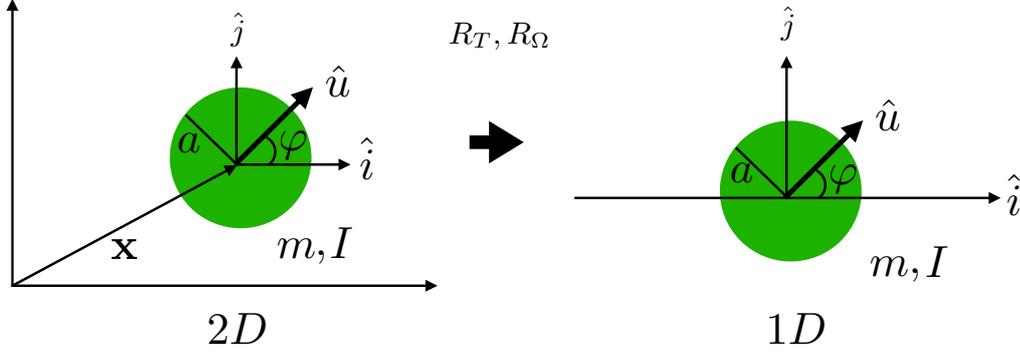


Figura 3.1: Modelo de partícula activa browniana: Partícula en forma de disco plano (color verde), de masa  $m$ , y momento de inercia  $I$  que se sumerge en un medio con coeficientes de arrastre  $R_T$  y  $R_\Omega$  (rotacional y traslacional) y que se dota de actividad mediante una fuerza de autopropulsión asociada a una rapidez de nado  $U(t)$  y una dirección de autopropulsión que queda determinada por el vector director  $\hat{u}$ .

Las ecuaciones de Langevin asociadas al modelo propuesto (en 1D, con  $U = cte$ ) vienen dadas por:

$$m \frac{dv}{dt} = -R_T v + R_T U \cos \varphi + \xi(t) \quad ; \quad \frac{dx}{dt} = v \quad (3.1)$$

$$I \frac{d\Omega}{dt} = -R_\Omega \Omega + \eta(t) \quad ; \quad \frac{d\varphi}{dt} = \Omega \quad (3.2)$$

Podemos observar que la traslación de la partícula [Ec.3.1] está acoplada debido a la actividad (término  $R_T U \cos \varphi$ ), mientras que la rotación [Ec.3.2] muestra un proceso independiente tipo Ornstein Uhlenbeck.

A pesar de que en las secciones anteriores no hemos hecho mención al movimiento de rotación de una partícula Browniana, (puesto que el modelo clásico propone partículas puntuales) cualquier tipo de proceso estocástico es capaz de caracterizarse a partir de los Formalismos de Fokker-Planck y de Langevin, pues las ecuaciones de Langevin, por ejemplo, en el caso de la rotación de nuestra partícula activa [Ec.3.2] son del tipo [Ec.2.18].

<sup>3</sup>No necesariamente las fluctuaciones son térmicas, también podrían ser fluctuaciones mecánicas, o debidas a la rugosidad del medio.

Dado que los ruidos, traslacionales y rotacionales, son blancos, se cumple que:

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2D\delta(t-t') \quad ; \quad \langle \xi(t) \rangle = 0 \quad (3.3)$$

$$\langle \eta(t)\eta(t') \rangle = 2D_\Omega\delta(t-t') \quad ; \quad \langle \eta(t) \rangle = 0 \quad (3.4)$$

$$\langle \xi(t)\eta(t') \rangle = 0 \quad (3.5)$$

donde  $D$  y  $D_\Omega$  son los coeficientes de difusión traslacional y rotacional, respectivamente. Al resolver el sistema dado por [Ec.3.1] y [Ec.3.2] mediante el formalismo de Langevin tendríamos la capacidad de calcular cantidades macroscópicas tales como el MSD o el MSS.

### 3.1.1. Límite sobreamortiguado

Al igual que en caso de materia pasiva una de las cantidades a calcular es el MSD, que como pudimos darnos cuenta, no depende de la inercia traslacional del sistema, pues la masa de las partículas es despreciable con respecto a el arrastre del medio. Pero ¿Qué ocurre con la inercia rotacional? Pues, podemos pensar que al ser proporcional a la masa, también será despreciable, sin embargo, también depende del tamaño de la partícula  $I = ma^2/2$ , entonces, primero pensaremos que la partícula es tan pequeña que su momento de inercia es despreciable en el límite sobreamortiguado.

El sistema de ecuaciones [Ec.3.1]-[Ec.3.2] en este límite tomarán la forma:

$$\frac{dx}{dt} = U \cos \varphi + \frac{1}{R_T} \xi(t) \quad (3.6)$$

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{1}{R_\Omega} \eta(t) \quad (3.7)$$

donde [Ec.3.7] corresponde a un proceso de difusión tradicional (proceso de Wiener) cuya ecuación de Smoluchowski asociada es:

$$\frac{\partial P(\varphi, t)}{\partial t} = D_R \frac{\partial^2 P(\varphi, t)}{\partial \varphi^2} \quad (3.8)$$

cuya solución bajo la condición inicial  $P(\varphi, t) = \delta(\varphi - \varphi_0)$  será:

$$P(\varphi, t|\varphi_0, t_0) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D_R(t-t_0)}} e^{-\frac{(\varphi-\varphi_0)^2}{4D_R(t-t_0)}} \quad (3.9)$$

donde  $D_\Omega = D_R R_\Omega^2$ .

Usando [Ec.3.9] es posible demostrar que la correlación entre componentes del vector orientación vienen dadas por [35]:

$$\langle \cos \varphi(t_1) \cos \varphi(t_2) \rangle = e^{-D_R |t_1 - t_2|} \quad (3.10)$$

Por lo tanto, al aplicar el formalismo de Langevin a [Ec.3.6] para obtener el MSD, es decir, al integrar directamente la ecuación, elevarla al cuadrado, y sacar el promedio, podemos demostrar que:

$$\begin{aligned} \langle (x(t) - x_0)^2 \rangle &= U^2 \int_0^t \int_0^t \langle \cos \varphi(t_1) \cos \varphi(t_2) \rangle dt_1 dt_2 \\ &+ \frac{1}{R_T^2} \int_0^t \int_0^t \langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle dt_1 dt_2 \end{aligned} \quad (3.11)$$

donde hemos empleado el hecho de que  $\langle \cos \varphi(t_i) \xi(t_j) \rangle = 0$ .

Al sustituir [Ec.3.10] y [Ec.3.3] en [Ec.3.11] podemos verificar que el MSD vendrá dado por:

$$\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle = 2D_{eff}t - \frac{U^2}{D_R^2} (1 - e^{-D_R t}) \quad (3.12)$$

donde  $D_{eff} = D_T + \frac{U^2}{2D_R}$  con  $D_T = DR_T^2$ .

A tiempos largos, i.e. ,  $t \gg 1/D_R$ , esta última expresión se reduce a:

$$\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle_{t \rightarrow \infty} = 2D_{eff}t \quad (3.13)$$

Por lo tanto, el movimiento de una partícula Browniana dotada de Actividad nos arroja un MSD lineal a tiempos largos, es decir, un proceso difusivo cuyo coeficiente de difusión tiende a un coeficiente efectivo  $D_{eff}$ , que lleva de manera implícita tanto la actividad de la partícula como el efecto de la rotación. Recordemos que el efecto debido a la actividad se debe al acoplamiento de la traslación con la rotación, dado que el proceso de difusión traslacional depende intrínsecamente de la evolución del vector director.

A pesar de obtener un resultado muy elegante, e interesante, hemos perdido información del sistema al eliminar dos grados de libertad en el límite sobreamortiguado. Sin embargo, antes de abordar los efectos de Inercia resolveremos el problema empleando el formalismo de Fokker-Planck en este límite, es decir, resolveremos la ecuación de Smoluchowski para una partícula activa Browniana.

La ecuación de Smoluchowski [14] (en 1D) asociada al sistema de ecuaciones [Ec.3.6]-[Ec.3.7] podemos demostrar que viene dada por:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -U \cos \varphi \frac{\partial P}{\partial x} + D_T \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + D_R \frac{\partial^2 P}{\partial \varphi^2} \quad (3.14)$$

cuya transformación al espacio de Fourier vendrá dada por:

$$\frac{\partial \tilde{P}}{\partial t} + ikU \cos \varphi \tilde{P} + D_T k^2 \tilde{P} = D_R \frac{\partial^2 \tilde{P}}{\partial \varphi^2} \quad (3.15)$$

donde:

$$\tilde{P}(k, \varphi, t) = \frac{1}{2\pi} \int P(x, \varphi, t) e^{-ikx} dx \quad (3.16)$$

Dado que [Ec.3.15] para el caso  $U=0$  tiene como solución un conjunto de eigenfunciones  $\{e^{-(D_T k^2 + D_R n^2)t} e^{in\varphi}\}$  donde  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  se propone que la solución para  $U \neq 0$  sea de la forma:

$$\tilde{P}(k, \varphi, t) = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \tilde{p}_n(k, t) e^{-(D_T k^2 + D_R n^2)t} e^{in\varphi} \quad (3.17)$$

donde al sustituir en [Ec.3.14] y ocupar la propiedad de ortogonalidad de la base  $e^{in\varphi}$  podemos demostrar que la ecuación asociada a los coeficientes  $\tilde{p}_n$  viene dada por:

$$\frac{d\tilde{p}_n}{dt} = -\frac{U}{2} ik e^{-D_R t} [\tilde{p}_{n-1} e^{2nD_R t} + \tilde{p}_{n+1} e^{-2nD_R t}] \quad (3.18)$$

donde existe un acoplamiento entre los coeficientes  $\tilde{p}_n$ ,  $\tilde{p}_{n-1}$  y  $\tilde{p}_{n+1}$ .

Dado que estamos interesados en conocer la distribución de posición de partículas, podemos verificar que la distribución marginal en  $k$  se reduce a:

$$\tilde{P}(k, t)_M = e^{-D_T k^2 t} \tilde{p}_0(k, t) \quad (3.19)$$

lo que nos permite concentrarnos exclusivamente en el coeficiente  $\tilde{p}_0$ .

Al desarrollar [Ec.3.18] para  $n = -1, 0, 1$ , tenemos que:

$$\frac{d\tilde{p}_0}{dt} = -\frac{U}{2} ik e^{-D_R t} [\tilde{p}_{-1} + \tilde{p}_1] \quad (3.20)$$

$$\frac{d\tilde{p}_1}{dt} = -\frac{U}{2} ik e^{-D_R t} [\tilde{p}_0 e^{2D_R t} + \tilde{p}_2 e^{-2D_R t}] \quad (3.21)$$

$$\frac{d\tilde{p}_{-1}}{dt} = -\frac{U}{2} ik e^{-D_R t} [\tilde{p}_{-2} e^{-2D_R t} + \tilde{p}_0 e^{2D_R t}] \quad (3.22)$$

Entonces para hallar una ecuación para  $\tilde{p}_0$  primero derivamos [Ec.3.20] con respecto a  $t$ , luego empleamos el Teorema de derivadas cruzadas, y finalmente sustituimos [Ec.3.21] y [Ec.3.22]. La ecuación para  $\tilde{p}_0$  podemos demostrar entonces que toma la forma:

$$\frac{d^2\tilde{p}_0}{dt^2} + D_R \frac{d\tilde{p}_0}{dt} = -\frac{U^2}{2}k^2\tilde{p}_0 - \frac{U^2}{4}k^2e^{-4D_R t} [\tilde{p}_{-2} + \tilde{p}_2] \quad (3.23)$$

donde podemos despreciar la contribución de los modos  $n = \pm 2$  ya que estos decaerán más rápido en el tiempo que los modos  $n = 0, \pm 1$ .

La ecuación para  $\tilde{p}_0$  se reduce entonces a:

$$\frac{d^2\tilde{p}_0}{dt^2} + D_R \frac{d\tilde{p}_0}{dt} = -\frac{U^2}{2}k^2\tilde{p}_0 \quad (3.24)$$

que es una ecuación conocida como la ecuación del telégrafo.

En el límite de tiempos largos, i.e.  $t \gg 1/D_R$ , la derivada de segundo orden en el tiempo se vuelve despreciable, por lo que entonces la ecuación toma la forma:

$$\frac{d\tilde{p}_0}{dt} = -\frac{U^2}{2D_R}k^2\tilde{p}_0 \quad (3.25)$$

cuya solución general es:

$$\tilde{p}_0 = A e^{-\frac{U^2}{2D_R}k^2 t} \quad (3.26)$$

donde  $A$  es una constante arbitraria que queda determinada al aplicar condiciones iniciales dadas por  $\tilde{p}_n(k, 0) = \frac{\delta_{n,0}}{2\pi}$ , dado que  $P(x, \varphi, 0) = \frac{\delta(x-x_0)}{2\pi}$  con  $x_0 = 0$ .

Bajo las condiciones particulares la solución a la distribución marginal vendrá dada por:

$$\tilde{P}(k, t)_M = \frac{1}{2\pi} e^{-(D_T + \frac{U^2}{2D_R})k^2 t} \quad (3.27)$$

cuya transformación al espacio inverso de Fourier implica una distribución gaussiana con coeficiente de difusión efectivo  $D_{eff} = D_T + \frac{U^2}{2D_R}$  de la forma:

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D_{eff} t}} e^{-\frac{x^2}{4D_{eff} t}} \quad (3.28)$$

Esto demuestra, de nuevo, que el MSD a tiempos largos para una partícula Browniana Activa en el límite sobreamortiguado viene dado por:

$$\langle x^2 \rangle = 2D_{eff} t \quad (3.29)$$

tal y como lo demostramos empleando el formalismo de Langevin.

Al despreciar los modos  $|n| \geq 2$  aproximamos la solución del problema en el límite  $D_R t \gg 1$ , es decir, en la situación rotacionalmente simétrica, donde los modos  $n = 0, \pm 1$  con suficientes para describirlo [14]. En esta situación la partícula realiza un proceso totalmente difusivo, pues imaginemos, la partícula inicialmente parte apuntando en cierta dirección, de tal modo que conforme va pasando el tiempo la fuerza estocástica rotacional hace que esta empiece a rotar de manera aleatoria, sin embargo, la independencia con su preferencia inicial se logra cuando  $t \gg 1/D_R$  (la correlación entre componentes de autopropulsión tiende a cero [véase Ec.3.10]), y entonces, es en ese momento cuando la partícula realiza un proceso totalmente difusivo en su rotación. Por esta razón es posible obtener desde ambos esquemas el MSD a tiempos  $t \gg 1/D_R$ .

### 3.1.2. Límite semi-amortiguado

Dado que es imposible obtener el MSS a partir del límite sobreamortiguado en la ecuaciones de Langevin, ya que los grados de libertad correspondientes a la velocidad traslacional y rotacional del sistema se desprecian, tendríamos entonces que resolver de manera exacta las ecuaciones de Langevin [Ec.3.1] y [Ec.3.2]. A pesar de que fue posible resolver el problema completo [14] recientemente, primero haremos otro límite en las ecuaciones de Langevin denominado el límite semi-amortiguado en el que los efectos de inercia rotacional se desprecian, es decir,  $I \rightarrow 0$ . Las ecuaciones asociadas a dicho límite son:

$$m \frac{dv}{dt} = -R_T v + R_T U \cos \varphi + \xi(t) \quad ; \quad \frac{dx}{dt} = v \quad (3.30)$$

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{1}{R_\Omega} \eta(t) \quad (3.31)$$

Al integrar directamente [Ec.3.30] tenemos que:

$$v(t) = v_0 e^{-\frac{R_T}{m}t} + \frac{1}{m} \int_0^t e^{-\frac{R_T}{m}(t-t')} [R_T U \cos \varphi(t') + \xi(t')] dt' \quad (3.32)$$

Por otro lado, empleando este resultado podemos verificar que se cumple:

$$\begin{aligned} \langle (v(t) - v_0 e^{-\frac{R_T}{m}t})^2 \rangle &= \frac{R_T^2 U^2}{m^2} \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{R_T}{m}(2t-t'-t'')} \langle \cos \varphi(t') \cos \varphi(t'') \rangle dt' dt'' \\ &+ \frac{1}{m^2} \int_0^t \int_0^t e^{-\frac{R_T}{m}(2t-t'-t'')} \langle \xi(t') \xi(t'') \rangle dt' dt'' \end{aligned} \quad (3.33)$$

donde hemos empleado de nuevo que  $\langle \cos \varphi(t_i) \xi(t_j) \rangle = 0$ .

Al sustituir [Ec.3.3] y [Ec.3.10] en esta última expresión e integrar podemos demostrar que:

$$\begin{aligned} \langle (v(t) - v_0 e^{-\beta t})^2 \rangle &= \frac{R_T^2 U^2}{m^2 (\beta + D_R)} \left[ \frac{(1 - e^{-2\beta t})}{2\beta} - \frac{(e^{-(\beta+D_R)t} - e^{-2\beta t})}{\beta - D_R} \right] \\ &+ \frac{D}{\beta m^2} (1 - e^{-2\beta t}) \end{aligned} \quad (3.34)$$

donde  $\beta = \frac{R_T}{m}$ .

Por lo tanto, a tiempos largos,  $t \rightarrow \infty$ , tenemos que el MSS tiende a:

$$\langle v^2 \rangle_{t \rightarrow \infty} = \frac{U^2}{2(1 + S_T)} + \frac{k_B T}{m} \quad (3.35)$$

donde  $S_T = \frac{\tau_M}{\tau_R}$ ,  $\tau_M = \frac{M}{R_T}$ ,  $\tau_R = \frac{1}{D_R}$ .<sup>4</sup>

A pesar de que el MSS tiende a un valor constante en el tiempo, el sistema está fuera del equilibrio termodinámico, pues, la energía que las partículas toman de sus alrededores para convertirlo en movimiento autodirigido ocasiona que haya un flujo de energía constante que provoca que el sistema tienda a un estado estacionario. Es evidente que la actividad añade un término al MSS pasivo que se asocia con el movimiento intrínseco de la partícula en el medio.

Por otro lado, resolver el mismo problema al usar el Formalismo de Fokker-Planck no es trivial, pues la ecuación parcial a resolver es:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -v \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial [(\beta v - \beta U \cos \varphi) P]}{\partial v} + \frac{D}{m^2} \frac{\partial^2 P}{\partial v^2} + D_R \frac{\partial^2 P}{\partial \varphi^2} \quad (3.36)$$

donde el término asociado a la actividad hace que la ecuación no sea separable, y por ende, que dificulte su tratamiento matemático. En el próximo capítulo veremos que el método de perturbaciones nos va a permitir trabajar con una ecuación parcial de este tipo, de tal manera que podríamos aplicar el método para poder abordar dicha ecuación.

### 3.1.3. Efectos de inercia rotacional (2D)

Si no despreciamos la inercia rotacional en la ecuación [Ec.3.2] tendríamos primero que hallar la correlación entre componentes del vector director  $\hat{u}$

<sup>4</sup>Nótese que de este resultado podemos obtener la energía cinética promedio del sistema.

debido a que la distribución rotacional ahora es resultado de un proceso de Ornstein Uhlenbeck. Una vez obteniendo la correlación podemos emplear de nuevo el formalismo ya conocido de Langevin para obtener el MSD y el MSS. Sin embargo, dado que los cálculos implícitos requieren un análisis extenso nos limitaremos solo a mencionar los resultados más relevantes para llegar a la solución del MSD y el MSS.

Las ecuaciones a resolver son de nuevo:

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -R_T \mathbf{v} + R_T U \hat{u} + \mathbf{f} \quad ; \quad \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v} \quad (3.37)$$

$$I \frac{d\Omega}{dt} = -R_\Omega \Omega + \eta(t) \quad ; \quad \frac{d\varphi}{dt} = \Omega \quad (3.38)$$

donde es posible demostrar que la correlación del vector director viene dado por:

$$\langle \hat{u}(t_1) \cdot \hat{u}(t_2) \rangle = e^{-S_R \left[ \frac{1}{\tau_I} |t_1 - t_2| - 1 + e^{-\frac{1}{\tau_I} |t_1 - t_2|} \right]} \quad (3.39)$$

donde  $\hat{u} = (\cos \varphi, \sin \varphi)$ ,  $S_R = \frac{\tau_I}{\tau_R}$ ,  $\tau_I = \frac{I}{R_\Omega}$  y  $\tau_R = \frac{1}{D_R}$ . Nótese que en el límite  $\tau_I \rightarrow 0$  la correlación tiende a [Ec.3.10].

Al emplear el formalismo de Langevin a las ecuaciones [Ec.3.37], tal y como lo hemos realizado en anteriores apartados, es posible mostrar que el MSD a tiempos largos es:

$$\langle \mathbf{x} \cdot \mathbf{x} \rangle = \frac{2U^2}{D_R} e^{S_R} S_R^{1-S_R} \Gamma(S_R, 0, S_R) t + 4D_T t \quad (3.40)$$

donde  $\Gamma(a, b, c) = \int_b^c q^{a-1} e^{-q} dq$  es la función gamma generalizada incompleta. Nótese, si  $S_R \rightarrow 0$ , entonces recobramos el resultado [Ec.3.29] para el caso sobreamortiguado. De igual manera obsérvese que esta expresión no es independiente de la masa de la partícula ya que el momento de inercia está implícito en la solución. Esto último es relevante, pues, en el caso pasivo el MSD es independiente de la masa de la partícula. Físicamente lo que ocurre es que la partícula se opone al cambio de dirección en cada colisión con las moléculas del medio, y por ende, entre más se oponga a este cambio de dirección, la partícula realizará en promedio un desplazamiento mayor con respecto al que lograría en el caso pasivo, donde la partícula no tiene oposición al cambio en su estado de movimiento.

Por otro lado, también es posible mostrar que el MSS a tiempos largos

tiene la forma:

$$\langle \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \rangle = \frac{U^2 e^{S_R}}{S_T} \left( \frac{1}{S_R} \right)^{\frac{S_R}{S_T} + S_R - 1} \Gamma \left( \frac{S_R}{S_T} + S_R, 0, S_R \right) + \frac{2D_T R_T}{m} \quad (3.41)$$

donde  $S_T = \frac{\tau_M}{\tau_R}$ ,  $\tau_M = \frac{M}{R_T}$ ,  $\tau_R = \frac{1}{D_R}$ .

En el estado estacionario el MSS tiende a una constante de la cual podemos obtener el promedio de la energía cinética de las partículas. Evidentemente esta última expresión depende de la inercia rotacional, así como de la velocidad de nado. Como las partículas transforman energía de sus alrededores para autopropulsarse el sistema está fuera del equilibrio termodinámico, sin embargo, dado que el flujo de energía es constante el proceso llega a un estado estacionario. Esta es la razón de que el MSS sea una constante. Finalmente, si tomamos el límite cuando la Inercia rotacional tiende a cero, es decir,  $S_R \rightarrow 0$ , recuperamos la expresión [Ec.3.35].

Podríamos pensar que es innecesario abordar el problema desde el formalismo de Fokker-Planck ya que ha sido posible obtener el MSD y el MSS de manera exacta desde el formalismo de Langevin, sin embargo, es fundamental resolverlo desde ese otro formalismo, pues, es necesario para plantear una teoría completa que caracterice a las partículas activas, tal y como existe en el caso pasivo. Recordemos que hasta este momento solamente hemos podido observar el efecto de la actividad en la distribución de posiciones (en el límite sobreamortiguado), pero, el efecto de la inercia en dicha distribución hasta este momento no hemos podido observarla. Tampoco sabemos qué ocurre con la distribución de velocidades de Maxwell-Boltzmann cuando las partículas del sistema son dotadas de actividad, tanto en el límite sobreamortiguado, como en el caso general con efectos de Inercia.

Finalmente, como hemos podido observar, el modelo de ABP's ha sido caracterizado de manera completa desde el formalismo de Langevin, mientras que van quedando muchos huecos, hasta el momento, al abordarlo desde el formalismo de Fokker-Planck. Nosotros hallamos una manera de poder avanzar un eslabón más en la caracterización completa del modelo propuesto, de manera que, en el siguiente capítulo lo abordaremos detalladamente.

# Capítulo 4

## Distribución de velocidades de “Maxwell-Boltzmann” para partículas activas

### 4.1. Introducción

James Clerk Maxwell basado en argumentos de la simetría entre colisiones [30], y Ludwig Boltzmann usando probabilidad y la condición de equilibrio (Teorema H) [6], descubrieron de manera independiente la función de distribución de probabilidad de velocidades para la materia diluida pasiva. Este descubrimiento fue un gran avance para la mecánica estadística, ya que, las propiedades de la materia diluida (gases o plasmas) como la presión y la difusión pueden ser inferidas de ella.

Como habíamos mencionado, en la actualidad los científicos están completamente comprometidos en el estudio de la materia activa [5, 8, 18, 21, 29, 39], que se define como un conjunto de elementos naturales, o artificiales, que se autopropulsan con su propia energía interna. Dado que esta energía interna hace que estos sistemas se encuentren fuera del equilibrio tenemos entonces la capacidad de modelar fenómenos vivos o inanimados que van desde escalas microscópicas, hasta escalas macroscópicas, tales como: un conjunto de bacterias nadadoras, el movimiento de partículas Janus, fluidos activos, el crecimiento de tejidos, la separación de fases inducida por motilidad, el autoensamblaje, entre otros más [17, 18, 41, 42, 44]. El comprender estos sistemas eventualmente conducirá a una tecnología basada en materiales activos [11, 31–33]. Uno de los mayores desafíos que se presentan actualmente es el de construir un marco teórico, dentro de la física estadística fuera del equilibrio, capaz de caracterizar la materia activa tal como la mecánica es-

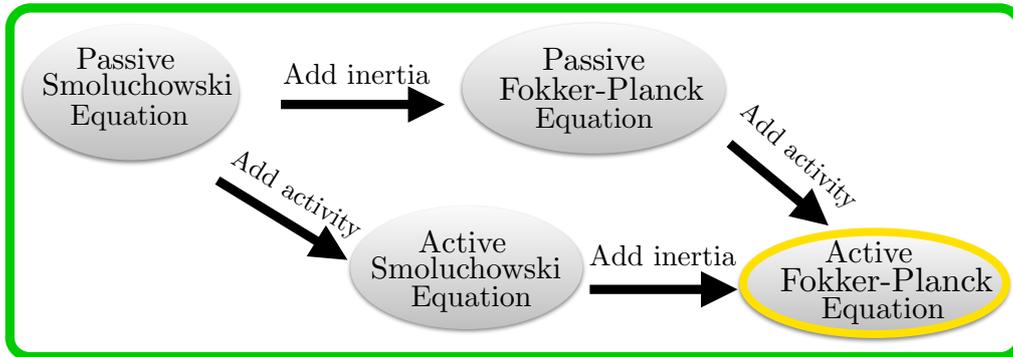


Figura 4.1: Progreso de la Mecánica Estadística fuera del equilibrio en la descripción de partículas brownianas pasivas y activas. En nuestro proyecto abordamos el caso encerrado en el óvalo color oro.

tadística caracterizó a la materia pasiva.

En esta sección mostramos la manera en que hallamos la luz para resolver la ecuación de Fokker-Planck de materia activa no interactiva sin despreciar la inercia rotacional y traslacional, de tal modo que, ampliamos las soluciones conocidas para la función de densidad de probabilidad de la velocidad de una partícula sujeta a fuerzas de disipación, fuerzas aleatorias y fuerza activa.

Como podemos apreciar en la figura 4.1, la mecánica estadística fuera del equilibrio ha resuelto la situación para partículas Brownianas pasivas en el límite sobreamortiguado (Ecuación de Smoluchowski), así como el caso de partículas Brownianas con masa (Ecuación de Fokker-Planck, véase capítulo 2), también se ha resuelto la situación para partículas Brownianas activas en el límite sobreamortiguado, y ahora, una nueva generalización para partículas Brownianas activas con masa y momento de inercia.

Como mencionamos, encontramos la función de distribución de velocidades para el estado estacionario de un modelo de partículas activas no interactivas, de manera que ésta es una especie de distribución de “Maxwell-Boltzmann” con la peculiaridad de ser una distribución bimodal y simétrica que contiene tanto el efecto de inercia del sistema, como el efecto de la actividad. Es importante destacar que contrario a lo que se conocía en el estudio de materia pasiva (donde las propiedades de transporte eran independientes de la masa a tiempos largos) se ha podido demostrar que para materia activa no interactiva se preserva la inercia debido al acoplamiento intrínseco en sus grados de libertad. Para validar nuestra distribución hemos comparado nuestra teoría tanto con simulaciones de la dinámica de Langevin como con resultados tomados de un experimento con vibrobots (siendo este un sistema macroscópico) [10, 28, 38].

Finalmente hemos usado nuestra distribución de velocidades para obtener el Mean Square Speed (MSS) para un sistema de materia activa totalmente dotado de inercia rotacional y traslacional con el objetivo de mostrar el potencial de nuestra nueva distribución para poder extraer información de ella y así imitar a la mecánica estadística que caracteriza a la materia pasiva.

## 4.2. Ecuación de Fokker-Planck para partícula activa libre

Empezaremos el análisis para una partícula en forma de disco de radio  $a$ , con masa  $M$  y momento de inercia  $I$ , que se autopropulsa en una dimensión espacial, y que no interactúa con alguna otra, donde su dinámica es descrita por su velocidad traslacional  $v(t)$ , su posición  $x(t)$ , su velocidad angular  $\Omega(t)$  y el ángulo  $\phi(t)$ , siendo este último el ángulo que describe la dirección de autopropulsión.

La dinámica de la partícula se describe mediante las ecuaciones de Langevin:

$$\frac{dv}{dt} = -\beta v + \beta U \cos \varphi + \frac{F(t)}{m} \quad ; \quad \frac{dx}{dt} = v \quad (4.1)$$

$$\frac{d\Omega}{dt} = -\beta_{\Omega} \Omega + \frac{g(t)}{I} \quad ; \quad \frac{d\varphi}{dt} = \Omega \quad (4.2)$$

donde  $U$  es la velocidad de autopropulsión de la partícula, que en nuestro caso la consideramos como una constante. Por otro lado  $\beta = \frac{R_T}{M}$  donde  $R_T$  representa la resistencia a la traslación,  $\beta_{\Omega} = \frac{R_{\Omega}}{I}$ , donde análogamente  $R_{\Omega}$  representa la resistencia a la rotación. A su vez  $\beta$  y  $\beta_{\Omega}$  representan al inverso de los tiempos de relajación característicos de traslación y rotación del sistema, mientras que  $D$  y  $D_{\Omega}$  son los coeficientes de difusión traslacional y rotacional, respectivamente. En las ecuaciones [Ec.4.1] y [Ec.4.2]  $F(t)$  y  $g(t)$  representan ruidos blancos estándar, es decir, que se caracterizan por:

$$\langle F(t)F(t') \rangle = 2D\delta(t-t') \quad ; \quad \langle F(t) \rangle = 0 \quad (4.3)$$

$$\langle g(t)g(t') \rangle = 2D_{\Omega}\delta(t-t') \quad ; \quad \langle g(t) \rangle = 0 \quad (4.4)$$

$$\langle F(t)g(t') \rangle = 0 \quad (4.5)$$

siendo la ecuación [Ec.4.5] la que indica que los procesos de traslación y rotación son procesos independientes.

Por otro lado, al comparar con las expresiones generales [Ec.2.19] y [Ec.2.21] donde  $\mathbf{x} = \{x, v, \varphi, \Omega\}$ , podemos demostrar que la ecuación de Fokker-Planck para nuestro modelo, al usar [Ec.2.35], viene dada por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_T}{\partial t} = & -v \frac{\partial P_T}{\partial x} + \frac{D}{m^2} \frac{\partial^2 P_T}{\partial v^2} + \frac{\partial[(\beta v - \beta U \cos \varphi) P_T]}{\partial v} \\ & - \Omega \frac{\partial P_T}{\partial \varphi} + \beta_\Omega \frac{\partial[\Omega P_T]}{\partial \Omega} + \frac{D_\Omega}{I^2} \frac{\partial^2 P_T}{\partial \Omega^2} \end{aligned} \quad (4.6)$$

### Distribución marginal de velocidades

Dado que el problema se centra en hallar la distribución de velocidades de una partícula activa con los efectos de inercia, entonces sólo nos interesará resolver la ecuación de Fokker-Planck para la distribución marginal  $P(\varphi, v, \Omega, t) = \int P_T(x, v, \varphi, \Omega, t) dx$ .

Podemos demostrar que la respectiva ecuación de Fokker-Planck para la distribución marginal  $P(\varphi, v, \Omega, t)$ , sujeta a la condición de frontera:

$$P_T(x = \pm\infty, v, \varphi, \Omega, t) = 0$$

vendrá dada por:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\Omega \frac{\partial P}{\partial \varphi} + \frac{\partial[(\beta v - \beta U \cos \varphi) P]}{\partial v} + \beta_\Omega \frac{\partial[\Omega P]}{\partial \Omega} + \frac{D}{m^2} \frac{\partial^2 P}{\partial v^2} + \frac{D_\Omega}{I^2} \frac{\partial^2 P}{\partial \Omega^2} \quad (4.7)$$

cuya solución particular debe estar sujeta a las condiciones de frontera  $B(P, \partial_q P) = 0$ , con  $q = \{v, \Omega\}$ , a la condición periódica:

$$P(\varphi + 2\pi, v, \Omega, t) = P(\varphi, v, \Omega, t)$$

y la condición inicial:

$$P(0) = \delta(\Omega - \Omega_0) \delta(v - v_0) / 2\pi \quad (4.8)$$

#### 4.2.1. Solución a la ecuación marginal de velocidades

Siguiendo el mismo método que usamos en materia pasiva (para resolver la ecuación de Fokker-Planck en el caso de partículas brownianas libres) tomamos la transformación de [Ec.4.7] al espacio de Fourier en velocidades ( $u$ ).

Nuestra ecuación de Fokker-Planck al transformarla se reescribirá como:

$$\frac{\partial \tilde{P}}{\partial t} + \beta u \frac{\partial \tilde{P}}{\partial u} + \beta U \cos \varphi i u \tilde{P} = -\frac{D}{m^2} u^2 \tilde{P} - \Omega \frac{\partial \tilde{P}}{\partial \varphi} + \beta \Omega \frac{\partial [\Omega \tilde{P}]}{\partial \Omega} + \frac{D_\Omega}{I^2} \frac{\partial^2 \tilde{P}}{\partial \Omega^2} \quad (4.9)$$

donde:

$$\tilde{P} = \int_{-\infty}^{\infty} P(v, \varphi, \Omega, t) e^{-iuv} dv \quad (4.10)$$

Sea solución a la ecuación [Ec.4.9] el siguiente ansatz:

$$\tilde{P}(\varphi, \Omega, u, t) = \psi_0(\Omega) \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{p}_n(u, \varphi, t) \psi_n(\Omega) e^{-u^2 f(t)} \quad (4.11)$$

donde

$$f(t) = \frac{D}{2\beta m^2} (1 - e^{-2\beta t}) \quad (4.12)$$

y además

$$\psi_0(\Omega) = \frac{\exp\left[-\frac{1}{4}\left(\frac{\Omega}{\Omega_a}\right)^2\right]}{\sqrt{\Omega_a}\sqrt{2\pi}}, \quad (4.13)$$

$$\psi_n(\Omega) = H_n\left(\frac{\Omega}{\sqrt{2}\Omega_a}\right) \frac{\exp\left[-\frac{1}{4}\left(\frac{\Omega}{\Omega_a}\right)^2\right]}{\sqrt{n!2^n\Omega_a}\sqrt{2\pi}} \quad (4.14)$$

con

$$\Omega_a = \sqrt{\frac{D_\Omega}{IR_\Omega}} = \sqrt{\frac{k_B T}{I}} \quad (4.15)$$

siendo  $H_m\left(\frac{v}{\sqrt{2v_{th}}}\right)$  el n-ésimo polinomio de Hermite.

Al introducir el ansatz [Ec.4.11] en [Ec.4.9] (y al emplear propiedades de ortogonalidad de los polinomios de Hermite, así como, otras de sus propiedades) podemos demostrar que la dinámica de los coeficientes  $\tilde{P}_n$  vendrá dada por:

$$\frac{\partial \tilde{p}_n}{\partial t} + \beta u \frac{\partial \tilde{p}_n}{\partial u} + \beta U \cos \varphi i u \tilde{p}_n = -\Omega_a \left[ \sqrt{n} \frac{\partial \tilde{p}_{n-1}}{\partial \varphi} + \sqrt{n+1} \frac{\partial \tilde{p}_{n+1}}{\partial \varphi} \right] - \beta \Omega n \tilde{p}_n \quad (4.16)$$

donde podemos observar el acoplamiento intrínseco entre la rotación y traslación de la partícula debido a la actividad.

## Distribución marginal en $\Omega$ de $\tilde{P}$

Como podemos observar, los polinomios  $\tilde{p}_n$  tienen un grado de libertad menos, ya que, hasta este punto han perdido la dependencia en la velocidad angular que está contenida en las eigenfunciones  $\psi_n(\Omega)$ . De nuevo, dado que nuestro interés se centra en conocer la función de distribución para las velocidades tomaremos ahora la marginal con respecto a  $\Omega$  que por definición viene dada por:

$$\tilde{P}(\varphi, u, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{P}(\varphi, \Omega, u, t) d\Omega \quad (4.17)$$

Entonces, al usar [Ec.4.11] podemos demostrar que:

$$\begin{aligned} \tilde{P}(\varphi, u, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{P}(\varphi, \Omega, u, t) d\Omega \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0(\Omega) \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{p}_n(u, \varphi, t) \psi_n(\Omega) e^{-u^2 f(t)} d\Omega \\ &= \tilde{p}_0 e^{-u^2 f(t)} \end{aligned} \quad (4.18)$$

donde hemos de usar la propiedad de ortonormalidad de las eigenfunciones  $\psi_n(\Omega)$  dada por:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m(\Omega) \psi_n(\Omega) d\Omega = \delta_{mn} \quad (4.19)$$

El resultado [Ec.4.18] es muy poderoso, pues, nos demuestra que el único coeficiente que contribuye en la distribución marginal  $\tilde{P}(\varphi, u, t)$  es el  $\tilde{p}_0(\varphi, u, t)$ , y por lo tanto, es el único que debemos de conocer para obtener la distribución de velocidades.

### 4.2.2. Ecuaciones de Jerarquía

Recordemos que el sistema de ecuaciones [Ec.4.16] recibe el nombre de ecuaciones de jerarquía, en inglés como “Hierarchy equations”, y el siguiente paso es resolverlo, sin embargo, como puede observarse además de ser un conjunto de ecuaciones acopladas entre sí, debido a los coeficientes  $\tilde{p}_n$ , son ecuaciones no separables debido al acoplamiento en el término activo.

Veamos, el sistema de Hierarchy estará sujeto a las condiciones iniciales:

$$\tilde{P}_n(u, \varphi, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{P}(\Omega, u, \varphi, 0) \frac{\psi_n}{\psi_0} d\Omega \quad (4.20)$$

donde  $\tilde{P}(\Omega, v, \varphi, 0)$  es la condición inicial [Ec.4.8] en el espacio de Fourier.

Antes de expandir nuestras ecuaciones para  $n = 0, 1, 2, 3..$  las adimensionalizaremos utilizando las siguientes definiciones:

$$\begin{aligned} \tau &= \frac{t}{\tau_M} = \beta t \quad ; \quad w = uv_{th} \\ b &= \frac{\beta\Omega}{\beta} \quad ; \quad \epsilon = \frac{\Omega_a}{\beta} \quad ; \quad U_{th} = \frac{U}{v_{th}} \end{aligned}$$

donde  $\tau_M = \frac{1}{\beta} = \frac{M}{R_v}$ .

El sistema de ecuaciones de Hierarchy adimensionales, para nuestro sistema, será entonces:

$$\frac{\partial \tilde{p}_n}{\partial \tau} + w \frac{\partial \tilde{p}_n}{\partial w} + iwU_{th} \cos \varphi \tilde{p}_n = -\epsilon \left[ \sqrt{n} \frac{\partial \tilde{p}_{n-1}}{\partial \varphi} + \sqrt{n+1} \frac{\partial \tilde{p}_{n+1}}{\partial \varphi} \right] - bn\tilde{p}_n \quad (4.21)$$

de tal manera que al expandir para  $n = 0, 1, 2$  obtenemos que el sistema a resolver será:

$$\frac{\partial \tilde{p}_0}{\partial \tau} + w \frac{\partial \tilde{p}_0}{\partial w} + iwU_{th} \cos \varphi \tilde{p}_0 = -\epsilon \frac{\partial \tilde{p}_1}{\partial \varphi} \quad (4.22)$$

$$\frac{\partial \tilde{p}_1}{\partial \tau} + w \frac{\partial \tilde{p}_1}{\partial w} + iwU_{th} \cos \varphi \tilde{p}_1 = -\epsilon \left[ \frac{\partial \tilde{p}_0}{\partial \varphi} + \sqrt{2} \frac{\partial \tilde{p}_2}{\partial \varphi} \right] - b\tilde{p}_1 \quad (4.23)$$

$$\frac{\partial \tilde{p}_2}{\partial \tau} + w \frac{\partial \tilde{p}_2}{\partial w} + iwU_{th} \cos \varphi \tilde{p}_2 = -\epsilon \left[ \sqrt{2} \frac{\partial \tilde{p}_1}{\partial \varphi} + \sqrt{3} \frac{\partial \tilde{p}_3}{\partial \varphi} \right] - 2b\tilde{p}_2 \quad (4.24)$$

donde a  $\epsilon = \frac{\Omega_a}{\beta}$  lo consideraremos como un parámetro de perturbación.

El introducir un parámetro perturbativo se considera por el hecho de que el sistema se desacopla totalmente cuando  $\epsilon \rightarrow 0$ , y esto ocurre cuando la masa  $m$  del sistema tiende a cero, o cuando, el tamaño de la partícula es muy grande. En el primer límite, la inercia rotacional es nula, pero también nuestro parámetro  $\tau$ . Para el segundo límite tenemos que la inercia rotacional se vuelve muy grande, o que la resistencia del medio es muy grande (dado que la resistencia del medio es proporcional al tamaño de la partícula). Por lo tanto, dado que ambos movimientos intrínsecamente están relacionados, pero que podemos considerar los grados de libertad como independientes, además de considerar la analogía con [38], estaremos considerando el segundo caso, donde la Inercia rotacional es grande ( $I \propto mr^2$  para un disco plano).

### Desacoplamiento para el caso $\epsilon = 0$

Para mostrar que es posible desacoplar el sistema para  $\epsilon = 0$  tomaremos nuestro sistema de Hierarchy para este caso particular. El sistema se reduce a resolver:

$$\frac{\partial \tilde{p}_n}{\partial \tau} + w \frac{\partial \tilde{p}_n}{\partial w} + iwU_{th} \cos \varphi \tilde{p}_n = -bn\tilde{p}_n \quad (4.25)$$

cuya solución general podemos verificar que viene dada por:

$$\tilde{p}_n(w, \varphi, \tau) = f_n(w e^{-\tau}) e^{-bn\tau} e^{-iwU_{th} \cos \varphi \tau} \quad (4.26)$$

donde  $f_n$  es una función que queda determinada al imponer la condición inicial del problema.

Como el único modo que necesitamos conocer para encontrar la distribución de velocidades es el  $n = 0$  solo tenemos que hallar la función particular  $f_n$  para éste. La condición inicial para este modo viene dada por:

$$\tilde{p}_0(w, \varphi, 0) = \frac{e^{-iw\tilde{v}_0}}{2\pi} \quad (4.27)$$

que al aplicar a [Ec.4.26] podemos demostrar que:

$$\tilde{p}_0 = \frac{1}{2\pi} e^{-iwe^{-\tau}\tilde{v}_0} e^{-iwU_{th} \cos \varphi (1-e^{-\tau})} \quad (4.28)$$

es solución a [Ec.4.25] para  $n = 0$  donde  $\tilde{v}_0 = \frac{v_0}{v_{th}}$ .

Por lo tanto, la distribución marginal  $\tilde{P}(v, \varphi, t)$  [Ec.4.18] vendrá dada por:

$$\tilde{P}(\varphi, w, t) = \frac{1}{2\pi} e^{-iwe^{-\tau}\tilde{v}_0} e^{-iwU_{th} \cos \varphi (1-e^{-\tau})} e^{-\frac{w^2}{v_{th}^2} f(t)} \quad (4.29)$$

cuya transformación inversa de Fourier corresponde a:

$$P = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\beta m^2}{2\pi D(1 - e^{-2\beta t})}} \exp \left[ -\frac{\beta m^2 (v - U \cos \varphi (1 - e^{-\beta t}) - v_0 e^{-\beta t})^2}{2D(1 - e^{-2\beta t})} \right] \quad (4.30)$$

resultado antes reportado que corresponde a la distribución en velocidad, y ángulo, de un sistema en el límite sobreamortiguado [38]. Además, podemos observar que al tomar el caso particular  $U = 0$  y hacer la integración Marginal

en  $\varphi$  en el intervalo  $[0, 2\pi]$  recuperamos la distribución de Maxwell-Boltzmann para partículas pasivas:

$$P(v, t) = \sqrt{\frac{\beta m^2}{2\pi D(1 - e^{-2\beta t})}} \exp\left[-\frac{\beta m^2}{2D(1 - e^{-2\beta t})} (v - v_0 e^{-\beta t})^2\right] \quad (4.31)$$

A pesar de que la distribución que se obtiene en este límite nos indica que es una distribución bimodal simétrica, igual a la que se observa en las simulaciones de la dinámica de Langevin, hemos perdido la información del momento de inercia de la partícula, pues al calcular el MSS, empleando esta distribución, es posible darse cuenta que su valor no es el correcto, pues en ese tipo de sistemas la inercia rotacional si tiene una contribución que hasta el momento se ha despreciado en la literatura.

### 4.3. Método perturbativo

Como hemos demostrado, al final del capítulo anterior, el sistema de ecuaciones formado por [Ec.4.22]-[Ec.4.24] es soluble únicamente para  $\epsilon = 0$  a todo orden, sin embargo, veremos más adelante que es posible resolver el sistema de Hierarchy para valores  $|\epsilon| \ll 1$  al emplear un método perturbativo.

Sea

$$\tilde{p}_i = \tilde{p}_{i0} + \epsilon \tilde{p}_{i1} + \epsilon^2 \tilde{p}_{i2} + \dots = \epsilon^m \tilde{p}_{nm} \quad (4.32)$$

solución al sistema de Hierarchy [Ec.4.22]-[Ec.4.24], donde  $\epsilon$  es el parámetro de perturbación, de tal manera que al introducirla en [Ec.4.21] podemos verificar que el sistema de  $n$  ecuaciones se transforma en:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{p}_{n,m}}{\partial \tau} + w \frac{\partial \tilde{p}_{n,m}}{\partial w} + iw U_{th} \cos \varphi \tilde{p}_{n,m} = \\ -\epsilon \left[ \sqrt{n} \frac{\partial \tilde{p}_{n-1,m-1}}{\partial \varphi} + \sqrt{n+1} \frac{\partial \tilde{p}_{n+1,m-1}}{\partial \varphi} \right] - bn \tilde{p}_{n,m} \end{aligned} \quad (4.33)$$

donde

$$\tilde{p}_{a,b} = 0 \quad \forall \{a, b\} < 0 \quad (4.34)$$

Dado que el sistema de ecuaciones de Hierarchy [Ec.4.22] involucra en cada ecuación los coeficientes  $\tilde{p}_n$ ,  $\tilde{p}_{n-1}$  y  $\tilde{p}_{n+1}$ , y además que nuestro interés se muestra solamente para el coeficiente  $\tilde{p}_0$ , expandiremos para  $n, m = 0, 1, 2$ .

**n=0 ; m=0,1,2**

$$\frac{\partial \widetilde{p}_{00}}{\partial \tau} + w \frac{\partial \widetilde{p}_{00}}{\partial w} + iwU_{th} \cos \varphi \widetilde{p}_{00} = 0 \quad (4.35)$$

$$\frac{\partial \widetilde{p}_{01}}{\partial \tau} + w \frac{\partial \widetilde{p}_{01}}{\partial w} + iwU_{th} \cos \varphi \widetilde{p}_{01} = -\frac{\partial \widetilde{p}_{10}}{\partial \varphi} \quad (4.36)$$

$$\frac{\partial \widetilde{p}_{02}}{\partial \tau} + w \frac{\partial \widetilde{p}_{02}}{\partial w} + iwU_{th} \cos \varphi \widetilde{p}_{02} = -\frac{\partial \widetilde{p}_{11}}{\partial \varphi} \quad (4.37)$$

**n=1 ; m=0,1,2**

$$\frac{\partial \widetilde{p}_{10}}{\partial \tau} + w \frac{\partial \widetilde{p}_{10}}{\partial w} + iwU_{th} \cos \varphi \widetilde{p}_{10} = -b\widetilde{p}_{10} \quad (4.38)$$

$$\frac{\partial \widetilde{p}_{11}}{\partial \tau} + w \frac{\partial \widetilde{p}_{11}}{\partial w} + iwU_{th} \cos \varphi \widetilde{p}_{11} = -\frac{\partial \widetilde{p}_{00}}{\partial \varphi} - \sqrt{2} \frac{\partial \widetilde{p}_{20}}{\partial \varphi} - b\widetilde{p}_{11} \quad (4.39)$$

$$\frac{\partial \widetilde{p}_{12}}{\partial \tau} + w \frac{\partial \widetilde{p}_{12}}{\partial w} + iwU_{th} \cos \varphi \widetilde{p}_{12} = -\frac{\partial \widetilde{p}_{01}}{\partial \varphi} - \sqrt{2} \frac{\partial \widetilde{p}_{21}}{\partial \varphi} - b\widetilde{p}_{12} \quad (4.40)$$

**n=2 ; m=0,1,2**

$$\frac{\partial \widetilde{p}_{20}}{\partial \tau} + w \frac{\partial \widetilde{p}_{20}}{\partial w} + iwU_{th} \cos \varphi \widetilde{p}_{20} = -2b\widetilde{p}_{20} \quad (4.41)$$

$$\frac{\partial \widetilde{p}_{21}}{\partial \tau} + w \frac{\partial \widetilde{p}_{21}}{\partial w} + iwU_{th} \cos \varphi \widetilde{p}_{21} = -\sqrt{2} \frac{\partial \widetilde{p}_{10}}{\partial \varphi} - \sqrt{3} \frac{\partial \widetilde{p}_{30}}{\partial \varphi} - 2b\widetilde{p}_{21} \quad (4.42)$$

$$\frac{\partial \widetilde{p}_{22}}{\partial \tau} + w \frac{\partial \widetilde{p}_{22}}{\partial w} + iwU_{th} \cos \varphi \widetilde{p}_{22} = -\sqrt{2} \frac{\partial \widetilde{p}_{11}}{\partial \varphi} - \sqrt{3} \frac{\partial \widetilde{p}_{31}}{\partial \varphi} - 2b\widetilde{p}_{22} \quad (4.43)$$

### 4.3.1. Solución a orden cero de $\tilde{p}_0$

Podemos observar que [Ec.4.35], [Ec.4.38] y [Ec.4.41] son equivalentes al sistema de Hierarchy original dado por [Ec.4.21], y entonces su solución general viene dada por [Ec.4.26], donde, de nuevo, queda por determinar  $f_n(we^{-\tau})$  por condiciones iniciales.

Veamos, para  $n = m = 0$ , tenemos que:

$$\tilde{p}_{00}(w, \varphi, \tau) = f_{00}(we^{-\tau}) e^{-iwU_{th} \cos \varphi} \quad (4.44)$$

donde  $f_{00}$  debe determinarse.

Recordemos que

$$\tilde{p}_0 = \tilde{p}_{00} + \epsilon \tilde{p}_{01} + \epsilon^2 \tilde{p}_{02} + \dots \quad (4.45)$$

es solución a nuestro coeficiente  $n = 0$  sujeto a:

$$\tilde{p}_0(w, \varphi, 0) = \tilde{p}_{00}(w, \varphi, 0) + \epsilon \tilde{p}_{01}(w, \varphi, 0) + \epsilon^2 \tilde{p}_{02}(w, \varphi, 0) + \dots = \frac{e^{-iw\tilde{v}_0}}{2\pi} \quad (4.46)$$

Dado que estamos interesados exclusivamente en la distribución de velocidades tomaremos el caso particular  $\tilde{v}_0 = 0$  para simplificar la matemática del problema. Es importante recordar que a tiempos largos la dependencia en el valor inicial de la velocidad  $v_0$  se perderá en la distribución de velocidades.

Por lo tanto, la igualdad [Ec.4.46] implica que los coeficientes  $\tilde{p}_{0j}$  tomarán como condiciones iniciales:

$$\tilde{p}_{00}(0) = \frac{1}{2\pi} \quad (4.47)$$

$$\tilde{p}_{01}(0) = 0 \quad (4.48)$$

$$\tilde{p}_{02}(0) = 0 \quad (4.49)$$

Entonces, al emplear la condición inicial para  $\tilde{p}_{00}$  podemos demostrar que:

$$\tilde{p}_{00} = \frac{1}{2\pi} e^{-iwU_{th} \cos \varphi (1-e^{-\tau})} \quad (4.50)$$

es solución a orden cero del coeficiente  $\tilde{p}_{00}$ .

### 4.3.2. Solución a primer orden de $\tilde{p}_0$

Para poder resolver [Ec.4.36] necesitamos primero resolver [Ec.4.38], cuya ecuación está desacoplada.

Veamos [Ec.4.38] nos dice que:

$$\frac{\partial \tilde{p}_{10}}{\partial \tau} + w \frac{\partial \tilde{p}_{10}}{\partial w} + iwU_{th} \cos \varphi \tilde{p}_{10} = -b\tilde{p}_{10} \quad (4.51)$$

de tal manera que, como mencionamos en la sección anterior, puede resolverse usando el método de las características.

La solución general a [Ec.4.51] viene dada por:

$$\tilde{p}_{10} = f_{10} (we^{-\tau}) w^{-b} e^{-iwU_{th} \cos \varphi} \quad (4.52)$$

donde, de igual manera,  $f_{10}$  se determina mediante condiciones iniciales<sup>1</sup>.

El análisis de condiciones iniciales implica que:

$$\tilde{P}_1(u, \varphi, 0) = 0 \quad (4.53)$$

que a su vez resulta que  $\tilde{p}_{1,j}(t = 0) = 0 \forall j$ .

Al aplicar estas condiciones iniciales a [Ec.4.52] nos lleva a que :

$$\tilde{p}_{10} = 0 \quad (4.54)$$

es decir, que la solución a [Ec.4.51] bajo la condición inicial [Ec.4.53], es nula.

Ahora conociendo la forma explícita de  $\tilde{p}_{10}$  podemos resolver [Ec.4.28], cuya expresión algebraica, recordemos, viene dada por:

$$\frac{\partial \tilde{p}_{01}}{\partial \tau} + w \frac{\partial \tilde{p}_{01}}{\partial w} + iwU_{th} \cos \varphi \tilde{p}_{01} = -\frac{\partial \tilde{p}_{10}}{\partial \varphi} \quad (4.55)$$

si introducimos el resultado [Ec.4.54], a esta última expresión, tendremos del lado derecho que:

$$\frac{\partial \tilde{p}_{10}}{\partial \varphi} = 0 \quad (4.56)$$

y por lo tanto, la ecuación diferencial inhomogénea a resolver es:

$$\frac{\partial \tilde{p}_{01}}{\partial \tau} + w \frac{\partial \tilde{p}_{01}}{\partial w} + iwU_{th} \cos \varphi \tilde{p}_{01} = 0 \quad (4.57)$$

---

<sup>1</sup>Véase apéndice condiciones iniciales Sec. 7.2.2

cuya solución general, como ya habíamos demostrado antes, viene dada por:

$$\tilde{p}_{01} = f_{01} (we^{-\tau}) e^{-iwU_{th} \cos \varphi} \quad (4.58)$$

Finalmente, al imponer la condición inicial dada por [Ec.4.48] obtendremos que:

$$\tilde{p}_{01} = 0 \quad (4.59)$$

es decir, la corrección a primer orden de  $\tilde{p}_0$  es nula.

### 4.3.3. Solución a segundo orden de $\tilde{p}_0$

Para resolver [Ec.4.37] es necesario conocer la forma explícita de  $\tilde{p}_{11}$  que tiene como ecuación [Ec.4.39], y a su vez, para determinar ésta necesitamos conocer la solución explícita de  $\tilde{p}_{20}$  cuya ecuación de evolución viene dada por:

$$\frac{\partial \tilde{p}_{20}}{\partial \tau} + w \frac{\partial \tilde{p}_{20}}{\partial w} + iwU_{th} \cos \varphi \tilde{p}_{20} = -2b\tilde{p}_{20} \quad (4.60)$$

y cuya solución general es dada por

$$\tilde{p}_{20} = f_2 (we^{-\tau}) w^{-2b} e^{-iwU_{th} \cos \varphi} \quad (4.61)$$

Al imponer la condición inicial [Ec.7.29]  $\left(\tilde{p}_{20}(\tau = 0) = -\frac{1}{2\pi\sqrt{2}}\right)$  podemos verificar que la solución particular viene dada por:

$$\begin{aligned} \tilde{p}_{20} &= -\frac{1}{2\pi\sqrt{2}} e^{-2b\tau} e^{-iwU_{th} \cos \varphi (1-e^{-\tau})} \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}} e^{-2b\tau} \tilde{p}_{00} \end{aligned} \quad (4.62)$$

Por lo tanto, ahora que ya tenemos la solución analítica a  $\tilde{p}_{20}$ , podemos resolver la ecuación a segundo orden de  $\tilde{p}_{02}$  dada por [Ec.4.37]. Al introducir [Ec.4.53] y [Ec.4.62] podemos verificar que [Ec.4.37] toma la forma:

$$\frac{\partial \tilde{p}_{11}}{\partial \tau} + w \frac{\partial \tilde{p}_{11}}{\partial w} + iwU_{th} \cos \varphi \tilde{p}_{11} = - (1 - e^{-2b\tau}) \frac{\partial \tilde{p}_{00}}{\partial \varphi} - b\tilde{p}_{11} \quad (4.63)$$

donde

$$\frac{\partial \tilde{p}_{00}}{\partial \varphi} = iwU_{th} \sin \varphi (1 - e^{-\tau}) \tilde{p}_{00} \quad (4.64)$$

con

$$\tilde{p}_{00} = \frac{1}{2\pi} e^{-iwU_{th} \cos \varphi (1 - e^{-\tau})} \quad (4.65)$$

Entonces, la ecuación a resolver se reduce a:

$$\frac{\partial \tilde{p}_{11}}{\partial \tau} + w \frac{\partial \tilde{p}_{11}}{\partial w} + iwU_{th} \cos \varphi \tilde{p}_{11} + b\tilde{p}_{11} = (1 - e^{-2b\tau}) (e^{-\tau} - 1) iwU_{th} \sin \varphi \tilde{p}_{00} \quad (4.66)$$

donde proponemos una solución de la forma:

$$\tilde{p}_{11} = w^{-b} e^{-iwU_{th} \cos \varphi (1 - e^{-\tau})} f_1(w, \varphi, \tau) \quad (4.67)$$

sin embargo, la condición inicial  $\tilde{p}_{11}(\tau = 0) = 0$  implica que  $f(w, \varphi, 0) = 0$ , y por lo tanto que la solución sea nula.

Entonces, al introducir [Ec.4.67], en [Ec.4.66], tenemos que:

$$\frac{\partial f_1}{\partial \tau} + w \frac{\partial f_1}{\partial w} = -\frac{1}{2\pi} (1 - e^{-2b\tau}) (1 - e^{-\tau}) iw^{b+1} U_{th} \sin \varphi \quad (4.68)$$

cuya solución particular podemos demostrar que viene dada por:

$$f_1 = -\frac{iU_{th}}{2\pi} \sin \varphi w^{b+1} e^{-(b+1)\tau} \left( \frac{e^{(b+1)\tau}}{b+1} - \frac{e^{b\tau}}{b} + \frac{e^{-(b-1)\tau}}{b-1} - \frac{e^{-b\tau}}{b} - \frac{2}{b(b^2-1)} \right) \quad (4.69)$$

Por lo tanto, ya tenemos de manera explícita la solución a [Ec.4.66] que debemos introducir en la ecuación [Ec.4.37] para obtener la contribución a segundo orden  $\tilde{p}_{02}$ .

Recordemos

$$\frac{\partial \tilde{p}_{02}}{\partial \tau} + w \frac{\partial \tilde{p}_{02}}{\partial w} + iwU_{th} \cos \varphi \tilde{p}_{02} = -\frac{\partial \tilde{p}_{11}}{\partial \varphi} \quad (4.70)$$

donde de [Ec.4.67] tenemos que:

$$\frac{\partial \tilde{p}_{11}}{\partial \varphi} = \frac{1}{2\pi} H(\tau) e^{-iwU_{th} \cos \varphi (1 - e^{-\tau})} [w^2 U_{th}^2 \sin^2 \varphi (1 - e^{-\tau}) - iwU_{th} \cos \varphi] \quad (4.71)$$

donde hemos definido

$$H(\tau) = e^{-(b+1)\tau} \left( \frac{e^{(b+1)\tau}}{b+1} - \frac{e^{b\tau}}{b} + \frac{e^{-(b-1)\tau}}{b-1} - \frac{e^{-b\tau}}{b} - \frac{2}{b(b^2-1)} \right) \quad (4.72)$$

Entonces, para resolver [Ec.4.70] proponemos, de nuevo, que la solución sea de la forma:

$$\tilde{p}_{02} = e^{-iwU_{th} \cos \varphi (1-e^{-\tau})} f_2(w, \varphi, \tau) \quad (4.73)$$

Ahora podemos verificar que nuestro problema se reduce a resolver

$$\frac{\partial f_2}{\partial \tau} + w \frac{\partial f_2}{\partial w} = -\frac{1}{2\pi} H(\tau) [w^2 U_{th}^2 \sin^2 \varphi (1 - e^{-\tau}) - iwU_{th} \cos \varphi] \quad (4.74)$$

bajo la condición <sup>2</sup>.  $f(w, \varphi, 0) = 0$  ya que  $\tilde{p}_{02} = 0$ .

De nuevo al emplear el método de las características podemos demostrar que la solución particular a  $f_2$  viene dada por:

$$\begin{aligned} f_2 = & -\frac{w^2 e^{-2\tau}}{2\pi} U_{th}^2 \sin^2 \varphi \left[ \frac{-4be^\tau + be^{2\tau} + 2b\tau - 2e^\tau + 2\tau}{2b(b+1)} \right] \\ & + \frac{w^2 e^{-2\tau}}{2\pi} U_{th}^2 \sin^2 \varphi \left[ \frac{e^{-2b\tau} (be^\tau - b + 1)^2}{2b^2 (b-1)^2} - \frac{2e^{-b\tau} (be^\tau - b + 1)}{b^2 (b-1)^2 (b+1)} \right] \\ & + \frac{iwe^{-\tau} U_{th}}{2\pi} \cos \varphi \left[ \frac{e^\tau}{b+1} - \frac{1}{b}\tau + \frac{e^{-2b\tau}}{2b^2} - \frac{e^{-(2b-1)\tau}}{(2b-1)(b-1)} + \frac{2e^{-b\tau}}{b^2(b^2-1)} \right] \\ & + \frac{w^2 e^{-2\tau}}{2\pi} U_{th}^2 \sin^2 \varphi \left[ \frac{-3b^3 + 7b^2 - 6b + 3}{2b^2 (b-1)^2} \right] - \frac{iwe^{-\tau} U_{th}}{2\pi} \cos \varphi \left[ \frac{4b^2 - 6b + 3}{2b^2 (2b-1)} \right] \end{aligned} \quad (4.75)$$

Por lo tanto, finalmente hemos obtenido de manera analítica, para todo tiempo  $\tau$ , la contribución a segundo orden de la solución en el espacio de  $(w)$  de Fourier del coeficiente  $\tilde{p}_0(w, \varphi, \tau)$

---

<sup>2</sup>Véase apéndice condiciones iniciales Sec. 7.2.3

## 4.4. Distribución de Velocidades

### 4.4.1. Transformada inversa de $\tilde{P}$

En las secciones anteriores hemos podido demostrar la capacidad del Método de perturbaciones para desacoplar y resolver nuestro sistema de Hierarchy. Por otro lado, recordemos que nuestro objetivo es obtener la distribución de velocidades por lo que empleamos directamente el resultado [Ec.4.18], es decir:

$$\tilde{P}(\varphi, u, t) = \tilde{p}_0 e^{-u^2 f(t)} \quad (4.76)$$

donde (hasta segundo orden) tenemos que:

$$\tilde{p}_0 = \tilde{p}_{00} + \epsilon^2 \tilde{p}_{02} \quad (4.77)$$

donde  $\tilde{p}_{00}$  y  $\tilde{p}_{02}$  vienen dados por [Ec.4.53] y [Ec.4.73] respectivamente.

Dado que sabemos que el sistema tiende a un estado estacionario, tomaremos el límite  $t \rightarrow \infty$  en [Ec.4.76] y también regresaremos a nuestras variables no adimensionales.

Por lo tanto, tenemos que hasta segundo orden nuestra distribución de velocidades, y ángulo, en el espacio de Fourier toma la forma:

$$\tilde{P} = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{u^2 D}{2\beta m^2}} e^{-iuU \cos \varphi} \left[ 1 + \epsilon^2 \frac{iuU \cos \varphi}{b+1} - \epsilon^2 \frac{u^2 U^2 \sin^2 \varphi}{2(b+1)} \right] \quad (4.78)$$

Por otro lado, recordemos que la transformada inversa de Fourier viene dada por:

$$P(\varphi, v) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{P}(\varphi, \Omega, u) e^{iuv} du \quad (4.79)$$

entonces, al introducir [Ec.4.78] es esta última expresión tenemos que nuestra distribución de velocidades, y ángulo, en el espacio será:

$$P = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{u^2 D}{2\beta m^2}} e^{-iuU \cos \varphi} \left[ 1 + \epsilon^2 \left[ \frac{iuU \cos \varphi}{b+1} - \frac{u^2 U^2 \sin^2 \varphi}{2(b+1)} \right] \right] e^{iuv} du \quad (4.80)$$

donde las respectivas integrales al realizarlas toman la forma

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{u^2 D}{2\beta m^2}} e^{-iuU \cos \varphi} e^{iuv} du = A e^{-\frac{\beta m^2}{2D} (v - U \cos \varphi)^2} \quad (4.81)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} (iu) e^{-\frac{u^2 D}{2\beta m^2}} e^{-iuU \cos \varphi} e^{iuv} du = -\frac{A(v - U \cos \varphi) \beta m^2}{D} e^{-\frac{\beta m^2}{2D}(v - U \cos \varphi)^2} \quad (4.82)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} u^2 e^{-\frac{u^2 D}{2\beta m^2}} e^{-iuU \cos \varphi} e^{iuv} du = A e^{-\frac{\beta m^2}{2D}(v - U \cos \varphi)^2} \left[ \frac{\beta m^2}{D} - \frac{\beta^2 m^4}{D^2} (v - U \cos \varphi)^2 \right] \quad (4.83)$$

donde

$$A = \sqrt{\frac{2\beta m^2 \pi}{D}}$$

Por lo tanto al sustituir estos resultados en [Ec.4.80] tendremos que:

$$P(v, \varphi) = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\beta m^2}{2\pi D}} e^{-\frac{\beta m^2}{2D}(v - U \cos \varphi)^2} \left[ 1 - \frac{\epsilon^2}{b+1} \left[ U \cos \varphi E_1 + \frac{U^2 \sin^2 \varphi}{2} E_2 \right] \right] \quad (4.84)$$

Esta es la función de distribución de probabilidad para  $v$  y  $\varphi$  de un sistema de ABP's no interactivas en 1D, donde hemos definido:

$$E_1 = \frac{(v - U \cos \varphi) \beta m^2}{D} \quad (4.85)$$

$$E_2 = \frac{\beta m^2}{D} - E_1^2 \quad (4.86)$$

Podemos observar que en el límite  $\epsilon = 0$ , es decir, inercias grandes (en el caso de un disco  $a \rightarrow \infty$ ) recuperamos la expresión [Ec.4.30] en el estado estacionario  $t \rightarrow \infty$

$$P(\varphi, v) = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\beta m^2}{2\pi D}} e^{-\frac{\beta m^2}{2D}(v - U \cos \varphi)^2} \quad (4.87)$$

#### 4.4.2. Función de distribución de velocidades para partículas activas con inercia

Al integrar marginalmente [Ec.4.87] con respecto al ángulo  $\varphi$  obtendríamos la función de distribución de velocidades para partículas activas libres,

no interactivas y con efectos de inercia. Sin embargo, obsérvese que analíticamente esta integral no puede realizarse por estar nuestra variable de integración contenida en forma de función trigonométrica en un exponente. Véase de manera explícita:

$$P(v) = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\beta m^2}{2\pi D}} \int_0^{2\pi} e^{-\frac{\beta m^2}{2D}(v-U \cos \varphi)^2} \left[ 1 - \frac{\epsilon^2}{b+1} [f_M(v, \varphi)] \right] d\varphi \quad (4.88)$$

donde

$$f_M(v, \varphi) = U \cos \varphi E_1 + \frac{U^2 \sin^2 \varphi}{2} E_2$$

Por lo tanto, a partir de aquí emplearemos herramientas numéricas para obtener resultados que validen nuestra distribución.

Podemos observar que los nuevos términos que aparecen en la distribución [Ec.4.84] dependen de la Actividad ( $U$ ), de la inercia traslacional y rotacional ( $\epsilon$ ). Esta contribución dual en la Inercia no había sido reportada anteriormente con el formalismo de Fokker-Planck. La contribución dual es importante, dado que esto codifica el efecto de la inercia rotacional en las propiedades del sistema. Este efecto (debido al acoplamiento de los grados de libertad de traslación y rotación) había sido observado con el formalismo de Langevin, al aplicarlo a un modelo genérico de partículas activas Brownianas [35, 36, 38]. Es interesante mencionar que el primer término en nuestra distribución [Ec.4.84] había sido propuesto en la literatura [3, 4, 13], sin embargo, a partir de nuestro tratamiento analítico éste término puede ahora ser identificado formalmente como el término de orden principal de nuestra ecuación jerárquica perturbada.

Por otro lado, si hacemos que  $U = 0$  en nuestra distribución [Ec.4.84], recuperamos la ya conocida distribución de velocidades de Maxwell-Boltzmann para materia pasiva no interactiva. A partir de otro tipo de tratamiento (Una mezcla entre el formalismo de Langevin y de Fokker-Planck) obtuvieron una distribución parecida a la que hemos reportado [38]. Para visualizar y verificar nuestra distribución [Ec.4.84] hemos realizado numéricamente la integración para la distribución marginal  $P(v) = \int_0^{2\pi} P(v, \varphi) d\varphi$ , y la hemos comparado con simulaciones de la dinámica de las ecuaciones de Langevin, así como con datos experimentales [35]. Nosotros, entonces, hemos aprovechado resultados experimentales de trabajos recientes sobre robots macroscópicos autopropulsados por vibración (vibrobots) [10, 28, 38]. Estos son discos sólidos de orden de centímetros, con patas elásticas, que vibran de manera vertical, creando así autopropulsión de manera artificial. De los experimentos reportados [38], hemos considerado un vibrobot de radio  $a$ , masa  $m$ , y momento de inercia

$I = ma^2/2$ , tal que sus números de Stokes traslacionales y rotacionales son  $S_T = \beta/\tau_R = 0,09$  y  $S_R = \beta_\Omega/\tau_R = 0,06$ , respectivamente, ( $\tau_R = 1/D_R$ ), su número de Péclet  $P_e = U^2\tau_R/D_T = 151$ , y consecuentemente con  $\epsilon = 0,4$ . Primero observaremos el efecto de la propulsión en nuestra nueva distribución de velocidades. Para ello, nosotros mantendremos fijos los parámetros anteriores y consideraremos dos velocidades de nado hipotéticas cuyos números de Péclet son  $P_e = \{2778, 4938\}$ . Nosotros sustituimos estos valores en la distribución marginal de nuestra distribución [Ec.4.84] ( $P(v)$ ) y la graficamos como una línea sólida y punteada de color verde en la figura 4.2. Las simulaciones de la dinámica de las ecuaciones de Langevin [Ec.4.1] y [Ec.4.2] también se realizan y se grafican en azul en la figura 4.2. Para realizar los promedios del conjunto se han considerado 2000 realizaciones. Finalmente, los valores experimentales de [38] son extraídos y graficados en la figura 4.2 como círculos amarillos. De la figura 4.2(a) a la Figura 4.2(c), tenemos que  $P_e = \{151, 2778, 4938\}$ , respectivamente. Este análisis indica que la distribución de velocidades se expande cuando la autopropulsión de la partícula incrementa, además, la distribución tiene dos modos simétricos, cada uno centrado alrededor de la velocidad de auto-propulsión del sistema. La figura también ilustra que la velocidad de la partícula cambia entre modos cuando ésta conduce hacia la derecha o hacia la izquierda. Estos gráficos demuestran la concordancia entre experimentos, simulaciones, y teoría, lo que confirma nuestra expresión teórica. Aunque los datos experimentales utilizados [38] contienen una pequeña torca, notamos por medio de simulaciones, que ésta puede despreciarse. Por otro lado, veremos que es posible predecir cantidades macroscópicas a partir de nuestra distribución de velocidades [Ec.4.84].

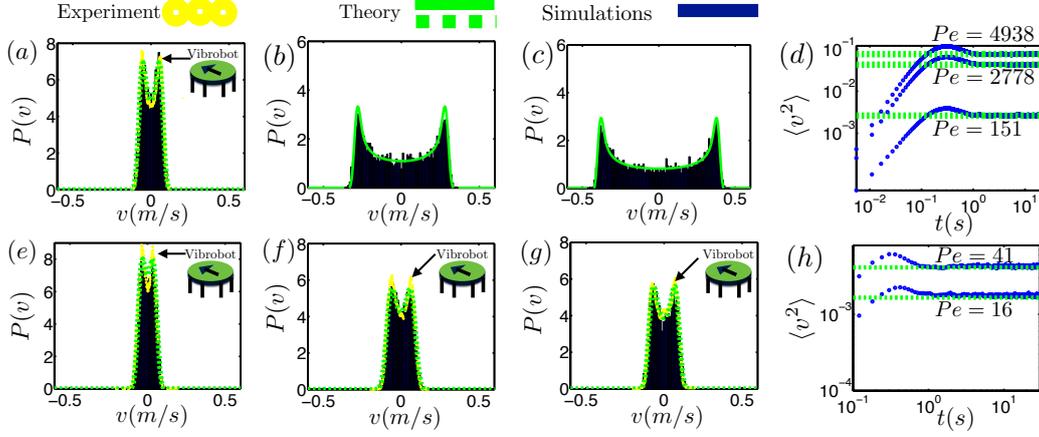


Figura 4.2: Distribución de velocidades y MSS (velocidad cuadrática media) como función de la propulsión ( $Pe$ ) y la inercia ( $S_T, S_R$ ) para discos sólidos autopropulsados no interactivos. Resultados teóricos, numéricos y experimentales son presentados, respectivamente, como líneas sólidas (o punteadas) en color verde, círculos amarillos, y barras azules. En (a)-(c), la velocidad de nado es incrementada, mientras que  $S_T = 0,09$  y  $S_R = 0,06$ , de acuerdo con los experimentos reportados en [38]. (a)  $Pe = U^2\tau_R/D_T = 151$  de experimentos. (b)  $Pe = 2278$  (velocidad hipotética). (c)  $Pe = 4938$  (velocidad hipotética). (d) MSS numérico (círculos azules) y teórico (línea punteada verde) [Ec.4.89] de los casos (a)-(c). En (e)-(g), la inercia cambia. Todos los datos son tomados de experimentos [ [38]]. (e)  $Pe = 16$ ,  $S_T = 0,48$  and  $S_R = 0,48$ . (f)  $Pe = 58$ ,  $S_T = 0,19$  and  $S_R = 0,03$ . (g)  $Pe = 41$ ,  $S_T = 0,39$  and  $S_R = 0,52$ . (h) MSS para los casos (e) y (g), donde, en azul se muestra resultado numérico y en línea verde punteada la teoría.

Para poder observar la predictibilidad de nuestra distribución [Ec.4.84], calcularemos la velocidad cuadrática media (o MSS, por sus siglas en inglés) a partir de ella, la cuál viene dada por:

$$\langle v^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} v^2 P(v) dv \quad (4.89)$$

sin embargo, no es necesario que tengamos la distribución marginal  $P(v)$  de nuestra distribución de manera explícita, pues, es posible demostrarse que esta cantidad viene dada por:

$$\langle v^2 \rangle = - \int_0^{2\pi} \frac{\partial^2 \tilde{P}(u, \varphi)}{\partial u^2} \Big|_{u=0} d\varphi \quad (4.90)$$

Entonces, al realizar todos los cálculos necesarios, utilizando la [Ec.4.78], podemos demostrar que:

$$\langle v^2 \rangle = \frac{D}{\beta m^2} + \frac{U^2}{2} \left( 1 - \frac{\epsilon^2}{b+1} \right) \quad (4.91)$$

Nótese que dicha expresión tiene la forma de la [Ec.3.41], la cual fue obtenida al emplear el formalismo de Langevin por el Dr. Sandoval en 2020 [35]. Esto demuestra que nuestra distribución, a pesar de ser una aproximación, muestra por primera vez (desde el formalismo de Fokker-Planck), que la inercia juega un papel importante en los sistemas activos.

Para verificar el resultado hemos, de nuevo, comparado nuestra teoría con simulaciones de las ecuaciones de Langevin con los mismos parámetros de los vibrobots de las figuras 4.2(a)-(c), donde hemos hecho 2000 realizaciones para calcular numéricamente el MSS de los 3 vibrobots antes mencionados. Los resultados son presentados en la figura 4.2(d), donde los datos de la simulación son mostrados en círculos azules, mientras que la expresión teórica (Ecuación [Ec.4.89]) es mostrada como una línea punteada de color verde. De nuevo, esto muestra una gran concordancia entre la teoría y las simulaciones, confirmando la predictibilidad de nuestra distribución [Ec.4.84]. El siguiente paso sería el variar la masa y el momento de inercia de nuestro sistema, y ver el efecto que existe en la función de distribución de velocidades de los vibrobots. Para complementar el análisis, de nuevo hemos considerado usar los datos experimentales de [38], entonces, la distribución de velocidades de “Maxwell-Boltzmann” en el estado estacionario para los tres vibrobots con distinta masa son mostrados en la figura 4.2(e)-(g). Aquí, la expresión teórica (la integral marginal angular de [Ec.4.84]) es mostrada como una línea verde punteada, los resultados experimentales son mostrados en círculos amarillos, mientras que las simulaciones dinámicas de las ecuaciones de Langevin son mostradas como barras azules. La figura 4.2(e) representa a un vibrobot con  $S_T = 0,04$ ,  $S_R = 0,01$ ,  $\epsilon = 0,69$ , y  $P_e = 16$ , mientras que la figura 4.2(f) representa a un vibrobot con  $S_T = 0,19$ ,  $S_R = 0,03$ ,  $\epsilon = 1$ , y  $P_e = 58$ . Finalmente, la figura 4.2(g) representa a un vibrobot con  $S_T = 0,39$ ,  $S_R = 0,52$ ,  $\epsilon = 0,54$ , y  $P_e = 41$ . Estas figuras demuestran, una vez más, la excelente concordancia entre la teoría, los experimentos, y las simulaciones. Para confirmar, de nuevo, la predictibilidad de la ecuación [Ec.4.84], hemos calculado el MSS de los dos últimos vibrobots, usando los mismos parámetros mencionados anteriormente, y haciendo 2000 realizaciones. Los resultados se presentan en la figura 4.2(h), donde la simulación es representada por círculos azules, mientras que la expresión teórica [Ec.4.89] es mostrada por una línea punteada en color verde. Una vez más, una excelente concordancia entre

teoría y simulación, que confirman la predictibilidad de nuestra distribución [Ec.4.84].

Es importante mencionar que la intención de poner la misma escala en el eje x [-0.5,0.5] de las figuras [4.2a)-c);e)-g)] fue la de mostrar el cambio de la distribución para los experimentos de la referencia [38]. Para observar con mayor detalle el ajuste entre el experimento, la teoría y las simulaciones véase la Figura 4.3.

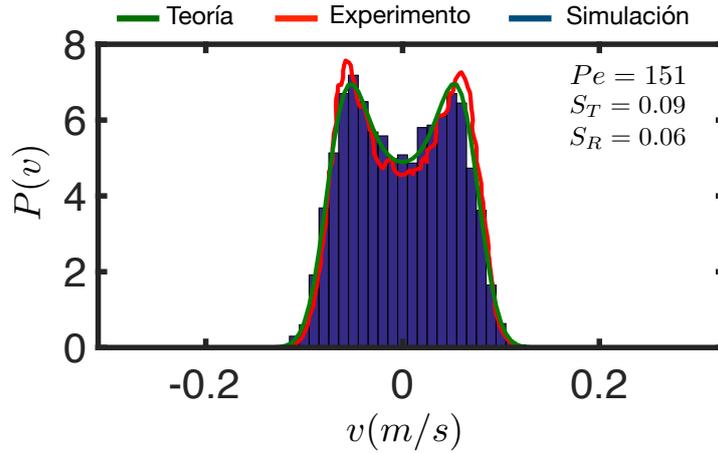


Figura 4.3: Ajuste entre datos experimentales, simulaciones y teoría para el experimento caracterizado por  $Pe = 151$ ,  $S_T = 0,09$  y  $S_R = 0,06$  de acuerdo a lo reportado en [37].

Como puede observarse hay un gran ajuste con respecto a los experimentos [38].

Por otro lado, para poder mostrar el efecto de inercia en nuestra distribución de velocidades, hemos integrado numéricamente la expresión [Ec.4.84] para diferentes valores de nuestro parámetro de perturbación  $\epsilon$ . Para ello, primero recordemos que  $\epsilon = \Omega_a/\beta$ , donde  $\Omega_a = \sqrt{\Omega_a/R_\Omega I}$  y  $\beta = R_T/m$ . En nuestro modelo consideramos que la partícula activa tiene forma de disco plano, y por tanto, momento de inercia  $I = ma^2/2$  donde  $a$  es el radio del disco. Bajo estas consideraciones nuestro parámetro de perturbación se reescribe como  $\epsilon = \sqrt{\frac{2D_\Omega m^2}{R_\Omega R_T^2 a^2}}$ .

Nótese como si cambiamos la masa de la partícula (o incrementamos la fricción) el parámetro de perturbación cambia. Para demostrar este efecto en la distribución de velocidades hemos graficado [Figura 4.4] para un sistema donde hemos variado la masa de la partícula. Los parámetros los he tomado, de nuevo, de la referencia [38] (con el fin de observar el efecto en un sistema real), particularmente del experimento con números de Stokes  $S_T = 0,09$ ,

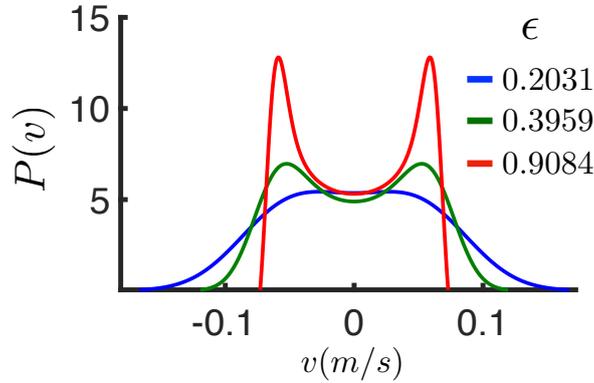


Figura 4.4: Distribución de velocidades del experimento caracterizado por los números de Stokes  $S_T = 0,09$ ,  $S_R = 0,06$ , y número de Péclet  $Pe = 151$ , en donde hemos variado la masa  $m$  de la partícula del experimento original.

$S_R = 0,06$ , y número de Péclet  $Pe = 151$ . En este experimento la partícula tiene masa  $m = 7,6 \times 10^{-4}kg$ , radio  $a = 6,6 \times 10^{-3}m$ , los coeficientes de difusión, traslacional y rotacional son,  $Db = 3,56 \times 10^{-5}m^2s^{-1}$ ,  $D_R = 0,91s^{-1}$ , respectivamente, y los coeficientes de arrastre, rotacional y traslacional son,  $R_\Omega = 2,44 \times 10^{-7}kgs^{-1}$ ,  $R_T = 0,0071kgs^{-1}$ , respectivamente. Nótese que hemos variado el valor de la masa  $m$  de manera artificial (alrededor del valor real del experimento  $m = 7,6 \times 10^{-4}kg$ ), pero, hemos mantenido los demás parámetros fijos. Los valores asociados de  $\epsilon$ , y de inercia  $I$ , para estos valores de masas ficticias los mostramos en el cuadro 4.1.

$\epsilon$	$m (\times 10^{-3}kg)$	$I (\times 10^{-8}kgm^2)$
0.2031	0.20	0.431
0.3959	0.76	1.64
0.9084	6.00	8.63

Cuadro 4.1: Masa y momento de inercia de una partícula activa de radio  $a = 6,6 \times 10^{-3}m$ . Note que  $\epsilon$  es proporcional a  $m$ .

La figura 4.4 demuestra la dependencia de nuestra distribución de velocidades con la masa de las partículas activas. El efecto debido a la inercia se debe a la imposición de la partícula a rotar, pues, si la partícula activa no puede rotar su preferencia por tomar valores alrededor de su velocidad de nado incrementa. Por esta razón, si el parámetro de perturbación incre-

menta, la probabilidad de tomar velocidades alrededor de las velocidades de autopropulsión incrementan, nótese como los picos de la distribución bimodal se vuelven más agudos [véase en Figura.4.4 distribución en color rojo a comparación con distribución en color verde]. También note como en el caso  $\epsilon = 0,2031$ , donde la masa  $m$  y el momento de inercia  $I$  son pequeños, la distribución colapsa en la distribución de “Maxwell-Boltzmann” clásica. La razón de esto es que la partícula tiende a rotar con tanta facilidad (su momento de inercia es despreciable) que su velocidad toma todos sus valores posibles, perdiendo su preferencia por tomar valores alrededor de la velocidad de autopropulsión.

Finalmente, como hemos mostrado, logramos obtener la distribución de velocidades análoga a la de “Maxwell-Boltzmann”, para un sistema de ABP’s en 1D con efectos de inercia rotacional, cuya relevancia, dentro del estudio de los sistemas activos, es tal que los resultados aquí reportados, junto con algunos avances para la distribución de posiciones con efectos de Inercia, fueron publicado en un artículo de la American Physical Society en 2021 [20]. Dicho artículo lo anexaremos en un documento adjunto.

# Capítulo 5

## The mean first-passage time of active particles on curved substrates

### 5.1. Introducción

Empecemos citando el ejemplo dado por Redner Sidney en el prefacio de su libro “A guide to first-passage time processes” [40]:

“Haces una cita con un colega a las 7:00 P.M en un centro comercial. Tu colega como es una persona puntual llega a las 6:55 y espera hasta las 7:05, pero como ve que no llegas decide marcharse. A las 7:06 llegas y supones que has llegado temprano, por lo que esperas. Son las 9:00 P.M y entonces decides retirarte porque tu colega te ha dejado plantado. Llegas a tu casa y marcas por teléfono a tu colega para saber por qué no asistió. Al contestar tú le dices que lo has esperado dos horas, y entonces él te menciona que se retiró un minuto antes de que tú llegaras. Le reclamas el por qué no te espero si la probabilidad de que llegaras entre las 7:00 P.M y las 9:00 P.M era de casi uno, entonces tu colega responde: La probabilidad de que llegaras no es relevante, pues lo relevante es que la probabilidad de que llegaras a las 7:00 P.M por primera vez fue nula. Y entonces tu colega cuelga el teléfono, pues, tiene razón ”

Entonces, si un evento dado (“la cita”) es activado cuando cierta variable aleatoria cruza por primera vez cierto umbral (“Que hubieras llegado a las cita a las 7:00 P.M”), se dice que es un proceso de primer paso (“First-passage”). Eventos tales como una reacción química, un pulso neuronal, la búsqueda de un objeto, la supervivencia a un depredador, o la quiebra de alguna compañía

de seguros, están íntimamente relacionados con procesos de primer paso, y por ello, la importancia en su estudio. Por ejemplo, en el caso de un pulso neuronal (que es la unidad fundamental de procesamiento de información del sistema nervioso), tenemos que este es causado cuando el potencial eléctrico generado en la membrana celular de la neurona cruza por primera vez cierto umbral cada cierto de tiempo, recibiendo este tiempo el nombre del tiempo de primer paso o en inglés “The mean first-passsage time”. En el caso de supervivencia podemos pensar en una persona que se ha pasado de copas y que va caminando por una acera que tiene una alcantarilla destapada. Dado su estado de alcoholización, su andar es azarosa, por lo que entonces es interesante saber cual es el tiempo promedio en que el sujeto caiga a la alcantarilla (evento) por primera vez (mean first-passage time), es decir, su tiempo de supervivencia antes de accidentarse. Entonces que el mean first-passage time esta asociado a eventos de primer paso tales como los que hemos ejemplificado arriba.

Con los anteriores ejemplos queda por sentada la importancia de su análisis, sin embargo, a pesar de ser tan relevante para caracterizar el que ocurran ciertos eventos, matemáticamente no existe una manera única y bien cimentada de cómo abordar dichos problemas, veamos el por qué. Recordemos los cursos básicos de Mecánica elemental, donde caracterizamos un sistema clásico a partir de las ecuaciones de movimiento de Newton. Todo sistema, recordemos, queda descrito por la evolución de sus grados de libertad  $\mathbf{q}$ , y de sus momentos generalizados asociados  $\mathbf{p}$ , siempre en función del parámetro temporal  $t$ . Responder cuál es el valor asociado a una cantidad medible  $\mathbf{x}$  al tiempo  $t$  es posible (una vez resolviendo el problema analíticamente) y a su vez, también es posible responder de manera inversa ¿A qué tiempo  $t$  la variable toma tal valor numérico  $\mathbf{x}$ ?, pues basta con despejar el parámetro  $t$  y dejarlo en función de las coordenadas generalizadas  $q_i$  y los momentos generalizados  $p_i$  (Cuando sea posible). En analogía, tenemos en los procesos estocásticos los problemas de primer paso. ¿Cuál es el tiempo medio de primer paso  $t$  de que la variable aleatoria  $\mathbf{x}$  tome por primera vez el valor numérico  $\mathbf{x}_0$ ?, pero en este caso, no sólo basta con tratar de despejar el parámetro  $t$  para dar una respuesta, pues este tiempo también es aleatorio, y por lo tanto, depende de una función de distribución de probabilidad  $F(t)$  que a su vez debe estar asociada a la función de densidad de probabilidad de la variable aleatoria  $\mathbf{x}$ . Es por esta dificultad que abordar este tipo de problemas es muy poco común, además del poco material en la literatura que existe para abordarlos<sup>1</sup>.

Dado que nuestro objetivo es conocer el mean first-passage time (MFPT

---

<sup>1</sup>véase por ejemplo Risken

en inglés) para un modelo de partículas dotadas de actividad y restringidas a moverse sobre canales unidimensionales no planos, partiremos de una analogía con el mean first-passage time de partículas pasivas brownianas, en 1D, en el que se ponen barreras absorbentes simétricas centradas en el punto de partida de la partícula, y para el cual existe una metodología bien definida para caracterizarlo. Por su simpleza matemática exterior (como veremos más adelante), no podemos dejar a un lado la estructura lógica que lo sustenta. Iniciaremos planteando el modelo matemático de partículas activas que trabajaremos, así como la manera en que se obtienen las ecuaciones de movimiento de Langevin que caracterizan su dinámica. Dado que la función de distribución de posiciones juega un papel íntimamente fundamental con la función de distribución del primer tiempo, emplearemos el método de Novikov para obtener la ecuación de Smoluchowski asociada a nuestro modelo en el límite sobrealmortiguado, pues esta ecuación nos dice el comportamiento de dicha distribución de las variables espaciales de nuestro modelo. Finalmente, generalizando la definición del MFPT a espacios curvos unidimensionales, obtenemos una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden para el MFPT, que resolveremos de manera numérica con ejemplos particulares. Dado los resultados obtenidos, hasta el momento (Diciembre de 2021), se han empezado a escribir en artículo para su publicación. Finalmente, es importante aclarar que es fundamental tener conocimientos previos sobre geometría diferencial para su análisis profundo, sin embargo, fuera de eso, la esencia del mismo puede observarse sin tener conocimientos específicos del mismo.

## 5.2. ABP's en espacios curvos

Como en todo problema físico, necesitamos un modelo matemático que nos permita describir de la manera más simple el problema que queremos resolver, en nuestro caso, el modelo de materia activa a utilizar es el mismo que se describió en el capítulo 3, sólo que esta vez el centro de masa de la partícula activa browniana se desplazará sobre una curva plana. La partícula en sí vivirá en el plano tangente a la curva, en donde también vivirá en vector director  $\hat{u}$  que indicará la dirección en donde la partícula se autopropulsa.

Como en todo sistema estocástico, es necesario emplear los formalismos de Langevin o de Fokker-Planck para poder caracterizar nuestro sistema. Nosotros emplearemos ambos formalismos de manera sutil para poder dar solución a nuestro problema. Es importante destacar que el mean first-passage time (MFPT) está íntimamente ligado a la función de distribución de posiciones de la partícula que se aborda a partir del formalismo de Fokker-Planck, sin embargo, es necesario viajar a través del formalismo de Langevin para co-

nocer las ecuaciones dinámicas de nuestras ABP's y a partir de ellas hallar la respectiva ecuación de Smoluchowski. Además, las ecuaciones dinámicas también serán útiles para realizar las simulaciones numéricas y con ello poder demostrar, con resultados estadísticos, la validez de nuestros resultados teóricos posteriores. En esta sección abordaremos, entonces, el modelo de una ABP sobre cualquier curva plana con métrica.

### 5.2.1. Ecuaciones de movimiento

#### Traslación del centro de masa

Olvidando por un momento la parte estocástica del fenómeno de difusión en nuestro modelo, tenemos que la ecuación de movimiento para el CM (centro de masa) de una ABP restringida a moverse dada una constricción  $g(q_i)$  viene dada por:

$$m\mathbf{a} = -\gamma\mathbf{v} + \mathbf{F}_{act} - \lambda\nabla g(q_i) \quad (5.1)$$

donde  $q_i$  es la  $i$ -ésima coordenada generalizada de nuestro sistema,  $\gamma$  es el coeficiente de fricción traslacional del medio donde está sumergida la partícula y  $m$  es su masa.

El termino  $\lambda\nabla g(q_i)$  representa la fuerza normal, a la constricción, que se requiere para que el movimiento esté restringido sobre la misma y que en el caso de que la constricción no evolucione en el tiempo, es decir  $\frac{dg(q_i)}{dt} = 0$ , podemos demostrar que el parámetro  $\lambda$  cumple:

$$\lambda = \frac{\mathbf{F}_{act} \cdot \nabla g}{|\nabla g|^2} \quad (5.2)$$

Por lo tanto la ecuación de traslación del centro de masa para una ABP restringida a cualquier espacio  $g(q_i)$  de manera explícita toma la forma:

$$m\mathbf{a} = -\gamma\mathbf{v} + \mathbf{F}_{act} - [\mathbf{F}_{act} \cdot \hat{n}] \hat{n} \quad (5.3)$$

donde definimos

$$\hat{n} = \frac{\nabla g}{|\nabla g|} \quad (5.4)$$

como vector normal unitario a la superficie de restricción.

Dado que estamos interesados en sistemas micrométricos, tomaremos el límite sobreamortiguado, es decir, despreciaremos la inercia en esta última expresión.

Entonces tenemos que en el límite sobreamortiguado la dinámica de la ABP viene dada por:

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{F}_{act}}{\gamma} - \left[ \frac{\mathbf{F}_{act}}{\gamma} \cdot \hat{n} \right] \hat{n} \quad (5.5)$$

### Evolución del vector director

Como lo mencionamos en el modelo de ABP que estamos empleando, la partícula en forma de disco lleva asociado un vector director  $\hat{u}$  que dirigirá la dirección de su autopropulsión, y por ende, de la dirección de la fuerza debido a esta actividad. Recordemos que la ABP vive en el plano tangente asociado al punto donde se encuentra el CM de la misma, por lo tanto, dentro de este mismo plano la ABP realiza un movimiento rotacional alrededor de un eje que pasa por el CM y que es normal a la restricción  $g(q_i)$ , es decir, un movimiento rotacional alrededor de  $\hat{n}$  (Véase Fig: 5.1). Como el CM de la partícula es dinámico, entonces, el  $\hat{n}$  y el plano tangente son dinámicos.

Si anclamos un sistema de referencia en el CM, y otro sistema de referencia fijo en el laboratorio, podremos darnos cuenta que el sistema de referencia del CM es un Sistema de Referencia no inercial.

El plano tangente en cada punto sobre la constricción se formará con un conjunto de vectores unitarios y perpendiculares, entre sí,  $\hat{\mathbf{e}}_i$ , tal y como podemos apreciar en la [figura.5.1]

Definimos

$$\hat{\mathbf{e}}_i = \frac{\mathbf{e}_i}{|\mathbf{e}_i|} \quad (5.6)$$

donde

$$\mathbf{e}_i = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_i} \quad (5.7)$$

Consideraremos que el sistema de referencia anclado al CM gira con la misma velocidad angular con la que gira el vector director  $\hat{u}$  alrededor del eje  $\hat{n}$ . Esta velocidad angular vendrá dada por

$$\boldsymbol{\omega} = \omega \hat{n} \quad (5.8)$$

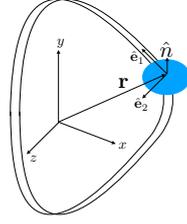


Figura 5.1: Partícula discal moviéndose sobre una restricción espacial. El centro de masa se mueve sobre la constrictión, mientras que el disco que la forma vive en el plano tangente asociado a dicho punto del centro de masa. La rotación de la partícula se da alrededor de un eje normal  $\hat{n}$  al plano tangente .

donde  $\omega$  es la rapidez angular de rotación del vector director.

La relación de la evolución temporal de un vector arbitrario  $\mathbf{b}$  entre un sistema de laboratorio y otro no inercial que rota con velocidad  $\boldsymbol{\omega}$  con respecto al de laboratorio, es

$$\left[ \frac{d\mathbf{b}}{dt} \right]_{lab} = \left[ \frac{d\mathbf{b}}{dt} \right]_{rot} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{b} \quad (5.9)$$

Ya que en nuestro caso el vector director  $\hat{u}$  visto desde el sistema de referencia anclado al CM está en reposo, tendremos que evoluciona como

$$\left[ \frac{d\hat{u}}{dt} \right]_{lab} = \boldsymbol{\omega} \times \hat{u} \quad (5.10)$$

Es importante mencionar que la velocidad angular en nuestro modelo de ABP será aleatoria, pues la ABP sólo gira debido a la torca externa que se produce por la colisión de las partículas del fluido, sin embargo, para simplificar el análisis del vector director, pensemos en un vector aleatorio  $\mathbf{g}$  con unidades de velocidad angular que vive en el plano tangente de la ABP, de tal manera que

$$\begin{aligned} \hat{u} \times \mathbf{g} &= |\hat{u}| |\mathbf{g}| \sin \Theta \hat{n} \\ &= |\mathbf{g}| \sin \Theta \hat{n} \end{aligned} \quad (5.11)$$

es un vector en dirección normal a la restricción, puesto que,  $\mathbf{g}$  y  $\hat{u}$  viven en el plano tangente.  $\Theta$  es el ángulo entre  $\hat{u}$  y  $\mathbf{g}$  ( $\hat{u}$  es unitario).

Comparando con  $\boldsymbol{\omega}$  podemos considerar que

$$\boldsymbol{\omega} = |\mathbf{g}| \sin \Theta \quad (5.12)$$

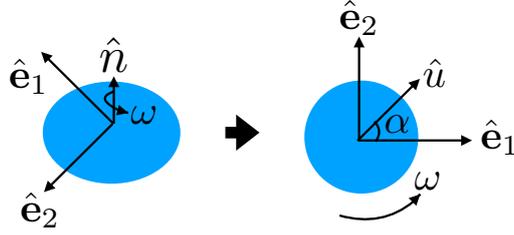


Figura 5.2: Diagrama que describe la dinámica del vector director  $\hat{u}$ .

sea la rapidez de la velocidad angular aleatoria que tiene la ABP. Esta suposición es válida, pues si  $\mathbf{g}$  hace que la ABP gire, entonces podemos pensar que este vector está asociado con una colisión aleatoria que afectará sólo cuando la dirección de movimiento autopropulsado por la ABP y la colisión formen un ángulo  $\Theta \neq n\pi$  con  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . La magnitud de  $\mathbf{g}$  es aleatoria, y  $\sin \Theta$  nos proporciona que tanto la colisión afecta a la velocidad angular.

Aceptando esto, tenemos que

$$\boldsymbol{\omega} = \hat{u} \times \mathbf{g} \quad (5.13)$$

y por tanto, la evolución de  $\hat{u}$  según [Ec.5.10] vendrá dada por

$$\left[ \frac{d\hat{u}}{dt} \right]_{lab} = \hat{u} \times \mathbf{g} \times \hat{u} \quad (5.14)$$

### 5.2.2. Componentes contravariantes de las ecuaciones de movimiento

#### Traslación

Tomando la ecuación [Ec.5.5], y teniendo en cuenta que la fuerza debido a la actividad queda definida como

$$\mathbf{F}_{act} = \gamma U \hat{u} \quad (5.15)$$

donde  $U$  es la rapidez de nado, que para efectos prácticos consideraremos que es una constante.  $\hat{u}$  es el vector director, que como mencionamos, nos indicará la dirección de movimiento autopropulsado de la partícula.

Observando la figura [Ec.5.2] tenemos que:

$$\begin{aligned}
\hat{u} &= \cos \alpha \hat{e}_1 + \sin \alpha \hat{e}_2 \\
&= \frac{\cos \alpha}{|\mathbf{e}_1|} \mathbf{e}_1 + \frac{\sin \alpha}{|\mathbf{e}_2|} \mathbf{e}_2 \\
&= u^a \mathbf{e}_a
\end{aligned} \tag{5.16}$$

donde  $u^a$  es la componente contravariante del vector  $\hat{u}$ .

Reescribiendo la ecuación [Ec.5.5] con las definiciones [Ec.5.15] y [Ec.5.16] tenemos que

$$\mathbf{v} = U u^a \mathbf{e}_a + U u^a [\mathbf{e}_a \cdot \hat{n}] \hat{n} \tag{5.17}$$

Proyectando sobre la base covariante podemos demostrar que las componentes contravariantes de nuestra ecuación de evolución toman la forma

$$v^b = U u^b \tag{5.18}$$

Recordemos que hasta el momento hemos omitido la fuerza estocástica debido a las fluctuaciones térmicas del medio. Más adelante mostraremos la manera de integrarlas.

## Rotación

Proyectando la ecuación dinámica rotacional [Ec.5.14] sobre el vector base  $\mathbf{e}_a$  podemos demostrar fácilmente que la ecuación de evolución para las componentes contravariantes del vector director viene dada por

$$\frac{du^a}{dt} + u^b v^c \Gamma_{bc}^a = g^a - u^a u_d g^d \tag{5.19}$$

donde  $\mathbf{g}$  es una torca aleatoria que codifica el efecto de las fluctuaciones rotacionales sobre la ABP cuya forma se propone como

$$\mathbf{g} = g^i \mathbf{e}_i \tag{5.20}$$

donde

$$g^i = \frac{\sqrt{2D_R}}{|\mathbf{e}_i|} \tilde{\eta}_i \tag{5.21}$$

con  $D_R$  coeficiente de difusión rotacional.

El proceso estocástico viene caracterizado por:

$$\langle \tilde{\eta}_i(t) \rangle = 0 \quad (5.22)$$

$$\langle \tilde{\eta}_i(t) \tilde{\eta}_j(t') \rangle = \delta_{ij} \delta(t - t') \quad (5.23)$$

donde  $\delta_{ij}$  es la delta de Kronecker

### 5.2.3. Ruido traslacional

Un proceso estocástico en un espacio plano podemos escribirlo de la forma [Ec.5.21], sin embargo, al ser el movimiento traslacional del CM sobre una curva plana, o generalizando, a un espacio curvo, debemos de hallar la forma que toma un proceso estocástico en este tipo de espacios.

El proceso estocástico dado por la ecuación de Langevin en el esquema de Ito es

$$dx^i = \sigma_k^i d\beta^k + m^i dt \quad (5.24)$$

la cual tiene asociado el generador infinitesimal, del proceso, aplicado a una función arbitraria  $f$  dado por

$$Gf = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \sigma_k^i \sigma_k^j \frac{\partial^2 f}{\partial x^i \partial x^j} + m^k \frac{\partial f}{\partial x^k} \quad (5.25)$$

Sabemos que el generador del proceso estocástico en cualquier espacio curvo para una partícula pasiva libre viene dado por

$$Gf = D_B g^{ij} \nabla_i \nabla_j f \quad (5.26)$$

donde  $\nabla_a$  representa el operador de derivada covariante y  $g^{ij}$  la componente  $i, j$  de la métrica del espacio curvo.

Podemos demostrar que podemos reescribir [Ec.5.26] como

$$Gf = D_B g^{ij} \frac{\partial^2 f}{\partial x^i \partial x^j} - D_B g^{ij} \Gamma_{ij}^k \frac{\partial f}{\partial x^k} \quad (5.27)$$

de tal manera que al comparar con [Ec.5.25] tenemos que

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j} \sigma_k^i \sigma_k^j = D_B g^{ij} \quad (5.28)$$

$$m^k = -D_B g^{ij} \Gamma_{ij}^k \quad (5.29)$$

si consideramos el caso donde la métrica es diagonal, podemos concluir que

$$\sigma_k^i = \sqrt{2D_B g^{ij} \delta_{kj}} \quad (5.30)$$

$$m^k = -D_B g^{ij} \Gamma_{ij}^k \quad (5.31)$$

Por lo tanto, la respectiva ecuación de Langevin para la partícula pasiva libre vendrá dada por

$$dx^i = \sqrt{2D_B g^{ij} \delta_{kj}} d\beta^k - D_B g^{kj} \Gamma_{kj}^i dt \quad (5.32)$$

Podemos observar que la ecuación de la partícula Browniana pasiva libre contiene un término de arrastre que es despreciado en espacios Euclideos y que, en efecto, aparece debido a la geometría del espacio. Además, para espacios no planos, el término difusivo contiene ruido multiplicativo, es decir, que el coeficiente que multiplica la “fuerza” aleatoria en el espacio curvo no es constante.

Entonces, dado que nuestro sistema contiene intrínsecamente un término de arrastre debido a la actividad, podemos generalizar nuestro análisis para que todo proceso estocástico de la forma:

$$\frac{dx^i}{dt} = b^i + \tilde{f}^i \quad (5.33)$$

se pueda reescribir como:

$$\frac{dx^i}{dt} = b^i - D_B g^{kj} \Gamma_{kj}^i + \sqrt{2D_B g^{ij} \delta_{kj}} \xi^k \quad (5.34)$$

donde  $\tilde{f}^i$  representa la contribución geométrica del proceso estocástico.

Dado que hemos considerado una analogía con el movimiento Browniano, en el espacio plano, también se considerará que las fuerzas estocásticas se caracterizan por :

$$\langle \xi^i(t) \rangle = 0 \quad (5.35)$$

$$\langle \xi^i(t) \xi^j(t') \rangle = \delta^{ij} \delta(t - t') \quad (5.36)$$

donde  $\delta^{ij}$  es la delta de Kronecker

### 5.2.4. Ecuaciones de movimiento

Tomando [Ec.5.18] y usando [Ec.5.34] tendremos que las ecuaciones de movimiento para una ABP restringida en cualquier espacio curvo vendrán dadas por:

$$\frac{dx^i}{dt} = U u^i - D_B g^{kj} \Gamma_{kj}^i + \sqrt{2D_B g^{ij} \delta_{kj}} \xi^k \quad (5.37)$$

$$\frac{du^a}{dt} + u^b \frac{dx^c}{dt} \Gamma_{bc}^a = g^a - u^a u_d g^d \quad (5.38)$$

donde podemos ver claramente que es un sistema de ecuaciones acopladas entre sí. La actividad acopla la ecuación de traslación de la partícula, mientras que la dinámica del vector director se acopla debido a la evolución temporal de los vectores unitarios que forman el SNIR, es decir, la dinámica del vector director está íntimamente ligada a la geometría del problema. Podemos observar que si la ABP es pasiva, es decir  $U = 0$ , el movimiento traslacional se vuelve independiente, mientras que la dinámica del vector director sigue dependiendo de la traslación de la partícula, es decir, de la evolución del SNIR .

## 5.3. Ecuación de Smoluchowski: ABP's sobre curvas planas

Para poder obtener el MFPT requerimos conocer la función de densidad de probabilidad de la posición de la ABP. La evolución temporal de la función

de densidad (en el límite sobreamortiguado) vendrá dada por la ecuación de Smoluchowski asociada al sistema de ecuaciones de Langevin [Ec.5.37] y [Ec.5.38], donde para poder obtenerla emplearemos el método desarrollado por Novikov [47].

En nuestro modelo de ABP's sobre curvas planas pensamos que el CM de la partícula vive en el plano  $XY$ , por lo que tendríamos dos grados de libertad traslacional  $r$  y  $\phi$  que estudiar, sin embargo, emplearemos constricciones del tipo  $r = r(\phi)$  donde sólo habrá un grado de libertad traslacional,  $x^1 = \phi$ , que es el ángulo que se forma entre el eje  $x$  y el vector posición  $\mathbf{r}$  de nuestra partícula.

Las curvas planas que emplearemos las podemos parametrizar de la forma

$$\mathbf{r} = (f(\phi), g(\phi), z = cte) \quad (5.39)$$

donde se cumplirá que el único símbolo de Christoffel no nulo será<sup>2</sup>:

$$\Gamma_{aa}^a \neq 0 \quad (5.40)$$

donde  $a$  representa al único grado de libertad traslacional  $\phi$ .

Por otro lado la partícula vive en el plano tangente formado por los vectores directores  $\hat{e}_\phi$  y  $\hat{e}_z$ , donde a pesar de que el movimiento del CM es en el plano  $XY$ , el movimiento del vector director también existe en dirección  $Z$ .

Recordemos entonces que

$$\mathbf{e}_\phi = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \phi} \quad (5.41)$$

$$\mathbf{e}_z = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial z} \quad (5.42)$$

son los vectores que forman el plano tangente a la curva plana. A partir de ellos es posible obtener la métrica asociada a cada geometría en particular.

Ahora, demostraremos que la dinámica de las componentes del vector director  $\hat{u}$  se puede simplificar a un grado de libertad dado por el ángulo  $\alpha$  que forma el sistema no inercial de referencia con el vector director  $\hat{u}$ .

---

<sup>2</sup>para ver demostración véase apéndice B 7.3

Veamos, dado que se cumple [Ec.5.40], usando [Ec.5.38], donde  $a = b = c$ , tenemos que la dinámica de las componentes del vector director vendrán dadas por

$$\frac{du^a}{dt} + u^a \frac{dx^a}{dt} \Gamma_{aa}^a = g^a - u^a u_d g^d \quad (5.43)$$

De las definiciones [Ec.5.16] y [Ec.5.21] podemos redefinir

$$u^i = \frac{v_i}{|\mathbf{e}_i|}; g^i = \frac{\tilde{g}_i}{|\mathbf{e}_i|} \quad (5.44)$$

donde  $v_i$  y  $\tilde{g}_i$  no son las componentes covariantes de sus respectivos vectores covariantes, más bien, son cantidades escalares.

Recordando que

$$|\mathbf{e}_i|^2 = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_i = g_{ii} \quad (5.45)$$

y usando [Ec.5.44] podemos demostrar que

$$\frac{dv_a}{dt} = \tilde{g}_a - v_a v_d \tilde{g}_d \quad (5.46)$$

desarrollando para  $(a, d = 1, 2)$  y considerando que el vector director es unitario

$$v_1^2 + v_2^2 = 1 \quad (5.47)$$

se llega a que la ecuación para  $\alpha$  viene dada por

$$\frac{d\alpha}{dt} = \sqrt{2D_R} (\cos \alpha \tilde{\eta}_2 - \sin \alpha \tilde{\eta}_1) \quad (5.48)$$

donde  $\tilde{\eta}_i$  es estocástica.

Por lo tanto, hemos demostrado que la dinámica rotacional de nuestro modelo de ABP's sobre curvas planas queda caracterizada solo por el ángulo  $\alpha$

### 5.3.1. Método de Novikov's

Recordemos, que se define la distribución de densidad de probabilidad para la posición de una ABP como

$$P(x^1, \alpha, t) = \left\langle \frac{1}{\sqrt{g}} \delta(x^1(t) - x^1) \delta(\alpha(t) - \alpha) \right\rangle \quad (5.49)$$

donde  $g$  es el  $\det \mathbb{G}$ ,  $x^1$  es la coordenada generalizada de nuestro sistema para la traslación, y  $\alpha$  el ángulo asociado al vector director. Empleando el método de Novikov que fue mostrado en la sección [Ec.2.2], empezamos derivando parcialmente [Ec.5.49] con respecto al tiempo

$$\frac{\partial P(x^1, \alpha, t)}{\partial t} = -\nabla_1 S^1 - \frac{\partial}{\partial \alpha} B \quad (5.50)$$

donde

$$S^1 = \left\langle \frac{1}{\sqrt{g}} \delta(x^1(t) - x^1) \delta(\alpha(t) - \alpha) \frac{dx^1(t)}{dt} \right\rangle \quad (5.51)$$

$$B = \left\langle \frac{1}{\sqrt{g}} \delta(x^1(t) - x^1) \delta(\alpha(t) - \alpha) \frac{d\alpha(t)}{dt} \right\rangle \quad (5.52)$$

$$\frac{dx^1(t)}{dt} = U u^1(x^1(t), \alpha(t)) + \sigma_1^1(x^1(t)) \xi^1(t) \quad (5.53)$$

y

$$\frac{d\alpha(t)}{dt} = \cos \alpha(t) \tilde{\eta}_2(t) - \sin \alpha(t) \tilde{\eta}_1(t) \quad (5.54)$$

Es fácil demostrar, siguiendo los pasos de la Sec. 2.2, que

$$S^1 = U u^1 P(x^1, \alpha, t) - \frac{1}{2} \sigma_1^1 \nabla_1 \sigma_1^1 P(x^1, \alpha, t) \quad (5.55)$$

$$B = -D_R \frac{\partial P(x^1, \alpha, t)}{\partial \alpha} \quad (5.56)$$

que al sustituir [Ec.5.55] y [Ec.5.56] en [Ec.5.50] tenemos que

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(x^1, \alpha, t)}{\partial t} = & -U \nabla_1 [u^1 P(x^1, \alpha, t)] + \frac{1}{2} \nabla_1^1 \sigma_1^1 \nabla_1 \sigma_1^1 P(x^1, \alpha, t) \\ & + D_R \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} P(x^1, \alpha, t) \end{aligned} \quad (5.57)$$

es la ecuación de Smoluchowski en el esquema de Stratonovich, sin embargo, dado que

$$\begin{aligned} \nabla_i \sigma_k^i &= 0 \\ \frac{1}{2} \sigma_1^1 \sigma_1^1 &= D_B g^{11} \end{aligned}$$

entonces, de manera explícita en el esquema de Ito, toma la forma

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -U u^1 \frac{\partial P}{\partial x^1} - D_B \Gamma_1^{11} g^{11} \frac{\partial P}{\partial x^1} + D_B g^{11} \frac{\partial^2 P}{\partial x^{12}} + D_R \frac{\partial^2 P}{\partial \alpha^2} \quad (5.58)$$

donde

$$\nabla_1 [u^1 P] = u^1 \frac{\partial P}{\partial x^1} \quad (5.59)$$

### 5.3.2. Tiempos largos

La ecuación [Ec.5.58] muestra la evolución de la densidad de probabilidad de que la partícula se encuentre en el intervalo  $(x, x + dx)$ , con su ángulo de orientación en el intervalo  $(\alpha, \alpha + d\alpha)$ , en el intervalo de tiempo  $(t, t + dt)$ . Sin embargo, consideraremos tiempos para lo cuales se cumple la condición  $t \gg \frac{1}{D_R}$ , es decir, cuando el proceso rotacional del sistema ha llegado a su estado puramente difusivo, esto debido a que los tiempos de primer paso (MFPT) para lo cuales queremos caracterizar el sistema cumplen esta condición. Necesitamos, entonces, conocer la forma que toma la ecuación [Ec.5.58] en el límite que nos interesa.

Basándonos en los métodos descritos en los análisis de ABP en espacios planos [14], propondremos que la solución a nuestra ecuación de FP será una combinación lineal de los eigenvectores asociados a la ecuación de FP para el caso rotacional. Sea solución a [Ec.5.58] el siguiente ansatz:

$$P(x^1, \alpha, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} P_n(x^1, t) e^{in\alpha} e^{-D_R n^2 t} \quad (5.60)$$

<sup>3</sup> Dado que nos interesa solo conocer la distribución de posiciones sobre la curva plana, basta con conocer la distribución marginal en posiciones de la expresión [Ec.5.60], y para ello se debe satisfacer:

$$P_M(x^1, t) = \frac{P_0}{2\pi} \quad (5.61)$$

Ahora sólo debemos ver la forma que toman los coeficientes  $p_n$  si [Ec.5.60] es solución a nuestra ecuación de FP.

Al introducir nuestro ansatz en [Ec.5.58] es posible demostrar que la ecuación de evolución a los coeficientes  $P_n$  viene dada por

$$\frac{\partial P_m}{\partial t} - D_B \Delta_M P_m = -\frac{Ue^{-D_R t}}{2\sqrt{g_{11}}} \left[ \frac{\partial P_{m-1}}{\partial x^1} e^{2D_R m t} + \frac{\partial P_{m+1}}{\partial x^1} e^{-2D_R m t} \right] \quad (5.62)$$

que es una ecuación de recurrencia entre los coeficientes  $P_m$ ,  $P_{m+1}$  y  $P_{m-1}$ .

Queremos saber cuál es el efecto que existe debido a la actividad de la partícula cuando  $t \gg \frac{1}{D_R}$ , para ello veamos la forma que toma la expresión para  $P_0$ , pues esta es la única que nos puede dar la información que requerimos según [Ec.5.61].

Donde

$$\Delta_M P_0 = \frac{1}{\sqrt{g_{11}}} \frac{\partial}{\partial x^1} \frac{1}{\sqrt{g_{11}}} \frac{\partial P_0}{\partial x^1} \quad (5.63)$$

es el operador de Laplace-Beltrami para 1-variedades Riemannianas.

Desarrollando [Ec.5.62] para  $n = -1, 0, 1$  tenemos que:

$$\frac{\partial P_0}{\partial t} - D_B \Delta_M P_0 = -\frac{Ue^{-D_R t}}{2\sqrt{g_{11}}} \left[ \frac{\partial P_{-1}}{\partial x^1} + \frac{\partial P_1}{\partial x^1} \right] \quad (5.64)$$

$$\frac{\partial P_{-1}}{\partial t} - D_B \Delta_M P_{-1} = -\frac{Ue^{-D_R t}}{2\sqrt{g_{11}}} \left[ \frac{\partial P_{-2}}{\partial x^1} e^{-2D_R t} + \frac{\partial P_0}{\partial x^1} e^{2D_R t} \right] \quad (5.65)$$

$$\frac{\partial P_1}{\partial t} - D_B \Delta_M P_1 = -\frac{Ue^{-D_R t}}{2\sqrt{g_{11}}} \left[ \frac{\partial P_0}{\partial x^1} e^{2D_R t} + \frac{\partial P_2}{\partial x^1} e^{-2D_R t} \right] \quad (5.66)$$

---

<sup>3</sup>El modo  $n=0$  nos permite observar la distribución marginal en posiciones

derivando parcialmente con respecto al tiempo la ecuación asociada al coeficiente  $P_0$  [Ec.5.64], tendremos una ecuación de segundo orden en la que introduciremos las ecuaciones asociadas a los coeficientes  $P_1$  y  $P_{-1}$ , de igual manera en que lo realizaron Sandoval y Sevilla [14], para obtener una ecuación de segundo orden solo para el coeficiente  $P_0$ . Dicha ecuación podemos demostrar fácilmente que viene dada por:

$$\frac{\partial^2 P_0}{\partial t^2} - D_B \frac{\partial}{\partial t} \Delta_M P_0 = -D_R \left( \frac{\partial P_0}{\partial t} - D_B \Delta_M P_0 \right) + \frac{U^2}{2} \Delta_M P_0 \quad (5.67)$$

Esta ecuación es análoga a la del telégrafo y rige el comportamiento del coeficiente  $P_0$ .

Reacomodando tenemos

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \frac{\partial P_0}{\partial t} - D_B \Delta_M P_0 \right] = -D_R \left[ \frac{\partial P_0}{\partial t} - D_B \Delta_M P_0 \right] + \frac{U^2}{2} \Delta_M P_0 \quad (5.68)$$

sin embargo, para los fines que nos interesan despreciamos los efectos de onda, es decir, el término de la izquierda dado que  $t \gg \frac{1}{D_R}$  [14]

$$\frac{\partial P_0}{\partial t} = \left( D_B + \frac{U^2}{2D_R} \right) \Delta_M P_0 \quad (5.69)$$

Por lo tanto ésta es la ecuación de Smoluchowski para una ABP a tiempos largos, y es la ecuación diferencial que emplearemos más adelante para la obtención del MFPT para un ensamble de ABP's sobre 1 variedad Riemanniana.

### 5.3.3. Estado estacionario ( $t \rightarrow \infty$ )

Aunque para nuestros fines no es necesario tener la solución a la ecuación [Ec.5.69] de manera explícita, es interesante ver la manera en que podemos abordar el problema.

Definimos

$$D_{eff} = D_B + \frac{U^2}{2D_R} \quad (5.70)$$

como un coeficiente de difusión efectivo. Entonces nuestra ecuación de difusión [Ec.5.69] puede reescribirse como:

$$\frac{\partial P_0}{\partial t} = D_{eff} \Delta_M P_0 \quad (5.71)$$

Por otro lado, podemos expandir  $P_0(\phi, t)$  como una combinación lineal de la forma:

$$P_0(\phi, t|\phi_0) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k(\phi_0, t)\Psi_k(\phi) \quad (5.72)$$

donde  $\{\Psi(\phi)\}$  forma una base completa de eigenfunciones propias asociadas al operador diferencial de Laplace-Beltrami  $\Delta_M$  que cumplen

$$\Delta_M \Psi_k(\phi) = -\lambda_k \Psi_k(\phi) \quad (5.73)$$

tal que

$$\lambda_0 = 0 \leq \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_j \leq \dots$$

son los eigenvalores propios asociados al set de eigenvectores propios a  $\Delta_M$ .

Por lo tanto, al introducir [Ec.5.72] en [Ec.5.71] tenemos que:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \Psi_k(\phi) \left[ \frac{C_k(\phi_0, t)}{dt} + D_{eff} \lambda_k C_k(\phi_0, t) \right] = 0 \quad (5.74)$$

lo que implica que

$$\frac{C_k(\phi_0, t)}{dt} + D_{eff} \lambda_k C_k(\phi_0, t) = 0 \quad (5.75)$$

y cuya solución viene dada por:

$$C_k(\phi_0, t) = C_k(\phi_0, 0) e^{-D_{eff} \lambda_k t} \quad (5.76)$$

Por lo tanto

$$P_0(\phi, t|\phi_0) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k(\phi_0, 0) e^{-D_{eff} \lambda_k t} \Psi_k(\phi) \quad (5.77)$$

y dado que nuestro sistema tiene como condición inicial

$$P_0(\phi, 0|\phi_0) = \frac{1}{\sqrt{G}} \delta(\phi - \phi_0)$$

podemos demostrar que:

$$P_0(\phi, t|\phi_0) = \sum_{k=0}^{\infty} e^{-D_{eff}\lambda_k t} \Psi_k(\phi) \Psi_k(\phi_0) \quad (5.78)$$

Como puede observarse, para  $t \rightarrow \infty$ , el único eigenvalor que contribuye a la solución es  $\lambda_0 = 0$ , que corresponde a la ecuación de eigenvectores [45]:

$$\Delta_M \Psi(\phi)_0 = 0 \quad (5.79)$$

Dado que  $\Psi_k(\phi)$  es un elemento de un espacio vectorial, este puede no ser único. Tomemos como posible solución:

$$\Psi(\phi)_0 = cte \quad (5.80)$$

Entonces, en el estado estacionario se cumple que:

$$P_0(\phi, t \rightarrow \infty|\phi_0) = |\Psi_0|^2 = cte^2 \quad (5.81)$$

y por tanto, por condición de normalización que

$$\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{\Omega_M}} \quad (5.82)$$

donde

$$\Omega_M = \int_M \sqrt{G} d\phi \quad (5.83)$$

Por lo tanto tenemos que a tiempos largos la distribución de partículas viene dada por:

$$P_0(\phi, t \rightarrow \infty|\phi_0) = \frac{1}{\Omega_M} \quad (5.84)$$

Además, de la definición de probabilidad en curvas planas, recordemos que:

$$\tilde{P}(\phi)_{steady} = \int_M P(\phi, t \rightarrow \infty) \sqrt{G} d\phi = \int_M \hat{P}(\phi) d\phi \quad (5.85)$$

y por lo tanto podemos verificar que

$$\hat{P}(\phi) = P(\phi, t \rightarrow \infty)\sqrt{G} = \frac{\sqrt{G}}{\int_M \sqrt{G}d\phi} \quad (5.86)$$

expresión que ha sido reportada en la literatura [19]

## 5.4. MFPT en curvas planas

Recordemos que la solución completa viene dada por [Ec.5.60] , en la cual consideramos que  $x^1 = \phi$ , entonces

$$\begin{aligned} P(\phi, \alpha, t) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} P_n(\phi, t)e^{in\alpha}e^{-D_R n^2 t} \\ &= P_0 + P_1 e^{i\alpha} e^{-D_R t} + O(e^{-4D_R t}) \end{aligned} \quad (5.87)$$

Por lo tanto, para tiempos largos que la solución es

$$P(\phi, \alpha, t) = P_0(\phi, t) \quad (5.88)$$

La distribución marginal para  $\alpha$  será entonces

$$p(\phi, t) = \int_0^{2\pi} P(\phi, \alpha, t)d\alpha = 2\pi P_0(\phi, t) \quad (5.89)$$

lo que implica que en nuestro caso

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \left( D_B + \frac{U^2}{2D_R} \right) \Delta_M p \quad (5.90)$$

será la ecuación de Smoluchowski para la distribución de posiciones de una ABP sobre una 1-variedad Riemmaniana.

El MFPT es el tiempo promedio que le toma a un ensamble de partículas brownianas pasar cierto umbral por primera vez dado que estas partieron de  $\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}(t = 0)$ . En espacios planos, tal y como se muestra en la Figura 5.3a, tenemos 2 grados de libertad traslacional (en el caso de movimiento en un plano) donde no existe dirección privilegiada de movimiento, por lo el MFPT se convierte en el tiempo que le toma a la partícula en llegar a una pared

absorbente en forma de circunferencia de radio  $r$ , centrada en  $\mathbf{r}_0$ , es decir, en cumplir la condición

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0| = r$$

En el caso unidimensional, el MFPT se reduce al tiempo promedio que tarda la partícula en alcanzar dos barreras puntuales absorbente puestas de manera simétrica con respecto a la posición inicial de la partícula  $x_0$  a una distancia  $d$ , tal y como se observa en la Figura 5.3b, es decir, el tiempo promedio en ser absorbidas en:

$$|x - x(0)| = d$$

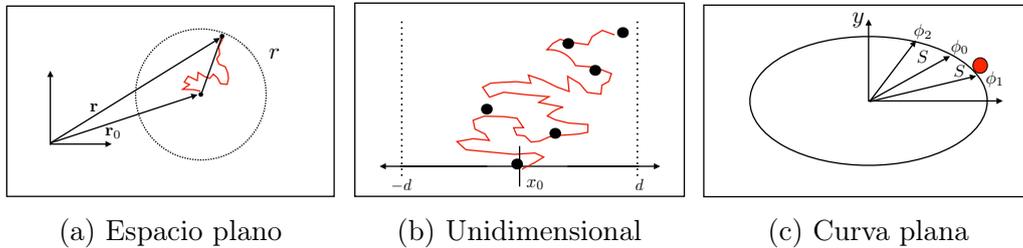


Figura 5.3: Diagramas que muestran la analogía entre el MFPT en espacios planos y en curvas planas. a) En el espacio plano 2D el MFPT se considera como el tiempo promedio de que la partícula cruce por primera vez el círculo concéntrico que tiene como origen su posición inicial. b) En el espacio unidimensional se reduce al tiempo promedio de cruzar por primera vez alguna de las barreras absorbentes puestas de manera simétrica con respecto a su punto de partida. c) en una curva plana se plantea como el tiempo promedio en que la partícula tarda en cruzar dos barreras absorbentes puestas sobre la curva plana.

En el caso particular de una ABP restringida a moverse sobre una curva plana las cosas se dificultan, pues como hemos analizado, en MFPT está ligado a recorrer cierta distancia. Para el caso de curvas planas, el movimiento que realiza la partícula es unidimensional, sin embargo, el movimiento se realiza sobre una curva en dos dimensiones. En principio el MFPT sería el equivalente a los casos antes mencionado, es decir, el tiempo promedio que una partícula tarda en recorrer cierta distancia por primera vez, en este caso la distancia sería una longitud de arco que en 1-variedades Riemmanianas viene dada por:

$$S(\phi, \phi_0) = \int_{\phi_0}^{\phi} \sqrt{g_{11}(\phi)} d\phi \quad (5.91)$$

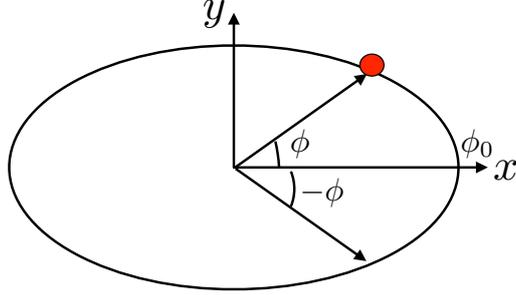


Figura 5.4: Partícula Browniana activa (representada por un punto rojo) restringida a moverse sobre una curva plana. El MFPT en nuestro modelo es el tiempo promedio que toma la partícula en cruzar cierto ángulo  $\phi$ , por primera vez, dado que ésta partió de cierto ángulo inicial  $\phi_0$ .

donde la integral a realizar es compleja e incluso imposible de resolver de manera exacta para la mayoría de geometrías no planas.

Lo anterior limitará nuestro estudio a casos particulares dado que la definición del MFPT implica simetría espacial de las barreras absorbentes con respecto al punto de partida, y en nuestro caso, estas barreras tendrían que hallarse a longitudes de arco iguales con respecto a  $\phi_0$ .

Si la figura es asimétrica con respecto al punto de partida, tal y como mostramos en la Figura 5.3c, entonces debemos hallar los ángulos  $\phi_1$  y  $\phi_2$  que cumplan:

$$S(\phi_1, \phi_0) = S(\phi_2, \phi_0) \quad (5.92)$$

y para ello sería necesario conocer de manera analítica la expresión [Ec.5.91], que como mencionamos, en muchos casos es imposible obtener.

Nuestro estudio entonces lo limitaremos a geometrías planas simétricas, y a puntos de partida  $\phi_0$  que sean simétricos con la geometría, es decir, para casos donde:

$$S(\phi_1, \phi_0) = S(-\phi_1, \phi_0) \quad (5.93)$$

Además si la geometría tiene simetría con respecto a los ejes  $X$  e  $Y$  se pueden tomar los casos para  $\phi_0 = 0, \frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2}$

Ahora que ya hemos hecho la analogía con respecto al MFPT en espacios planos, y hemos dado la condición sobre la ubicación de las barreras absorbentes, podemos proceder en hallar el MFPT para ABPs sobre 1-variedades Riemannianas.

Ahora el problema en cuestión es hallar la función de densidad (PDF) de probabilidad del tiempo  $\tau$  que tarda la partícula en llegar a alguna de las barrera dado que éste es aleatorio, esto debido a que el MFPT no es más que el primer momento de ésta variable aleatoria  $\tau$ .

Replanteemos la situación física del problema, si soltamos una ABP inicialmente en  $\phi_0 = 0$  al tiempo  $t = 0$ , y hay dos barreras absorbentes en  $\phi_1$  y  $-\phi_1$ , que son simétricas con respecto al eje  $X$ , después de cierto tiempo estas barreras absorben a las partículas al llegar a ellas. Como la ABP se mueve de manera aleatoria esto se podría pensar como cual es la probabilidad de que la ABP esté, o no, en el intervalo  $-\phi \leq \phi \leq \phi$ , es decir:

$$W(\phi_1 \leq \phi \leq 2\pi - \phi_1, t) = 0 \quad (5.94)$$

$$W(\phi \leq |\phi_1|, t) = 1 \quad (5.95)$$

La expresión [Ec.5.94] nos indica que la probabilidad de que la partícula se encuentre fuera de la zona donde la partícula puede vivir es nula, pues toda partícula fuera del intervalo válido ha asido absorbida, y esta desapareció, en otras palabras, la partícula no puede existir fuera del intervalo  $-\phi_1 \leq \phi \leq \phi_1$ , por otro lado [Ec.5.95] indica que la probabilidad de que la partícula aún no haya sido absorbida al tiempo  $t$  es siempre 1.

Recordemos que distribución de posición de una ABP sobre una 1-variedad Riemanniana a tiempos  $\tau \gg \frac{1}{D_R}$  es gobernada por:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D_{eff} \Delta_{MP} \quad (5.96)$$

donde  $D_{eff} = D_B + \frac{U^2}{2D_R}$ . Dado la [Ec.5.94] y [Ec.5.95] podemos decir que nuestro problema está sujeto a las condiciones de frontera:

$$p(\phi, 0 | \phi_0, 0) = \frac{1}{\sqrt{g}} \delta(\phi - \phi_0); \quad \phi \leq |\phi_1| \quad (5.97)$$

y

$$p(\phi, t | \phi_0, 0) = 0; \quad \phi = \phi_1 \quad o \quad \phi = \phi_2 = -\phi_1 \quad (5.98)$$

Por otro lado la probabilidad de que las partículas, que iniciaron en  $\phi_0$ , no hayan atravesado ninguna de las fronteras al tiempo  $t$ , es decir, la probabilidad de supervivencia es

$$S(t|\phi_0) = \int_{-\phi_1}^{\phi_1} p(\phi, t|\phi_0, 0)\sqrt{g}d\phi \quad (5.99)$$

y por lo tanto la probabilidad de ser absorbidas al tiempo  $t$  es

$$S_{abs}(t|\phi_0) = 1 - S(t|\phi_0) \quad (5.100)$$

entonces, la probabilidad de que el MFPT sea mayor a  $t$  vendrá dado por

$$P_r\{\tau > t\} = \int_t^{\infty} \varrho(\tau|\phi_0)d\tau \quad (5.101)$$

donde  $\varrho(\tau|\phi_0)$  es la función de distribución de probabilidad del MFPT.

Recordemos

$$\varrho(\tau|\phi_0)d\tau \quad (5.102)$$

es la probabilidad de que  $\tau$  se halle en el intervalo  $\tau, \tau + d\tau$ , y esta probabilidad es igual a la probabilidad de que la partícula se halla absorbido en ese intervalo, es decir:

$$\begin{aligned} \varrho(\tau|\phi_0)d\tau &= S_{abs}(\tau + d\tau|\phi_0) - S_{abs}(\tau|\phi_0) \\ &= -[S(\tau + d\tau|\phi_0) - S(\tau|\phi_0)] \end{aligned} \quad (5.103)$$

y por tanto, si  $d\tau \rightarrow 0$ , tenemos que:

$$\begin{aligned} \varrho(\tau|\phi_0) &= - \lim_{d\tau \rightarrow 0} \frac{[S(\tau + d\tau|\phi_0) - S(\tau|\phi_0)]}{d\tau} \\ &= - \frac{\partial S(\tau|\phi_0)}{\partial \tau} \end{aligned} \quad (5.104)$$

Dado que el MFPT es el primer momento de la función de distribución de probabilidad  $\varrho(\tau|\phi_0)$ , entonces, es posible demostrar que la expresión del

MFPT en función de la función de distribución de probabilidad viene dada por:

$$\begin{aligned} MFPT = \langle \tau(\phi_0) \rangle &= \int_0^\infty \tau \varrho(\tau|\phi_0) d\tau \\ &= \int_0^\infty \int_{\phi_2}^{\phi_1} p(\phi, \tau|\phi_0, 0) \sqrt{g} d\phi d\tau \end{aligned} \quad (5.105)$$

Entonces, debemos hallar alguna manera para poder introducir la ecuación de Smoluchowski que obtuvimos, sin embargo esto no es directo debido a que el operador de Beltrami actúa sobre las variables de integración.

#### 5.4.1. Backward Kolmogorov equation

En este punto es conveniente utilizar la ecuación de Chapman-Kolmogorov, que en espacios curvos viene dada por

$$p(\phi_1, t_1|\phi_0, t_0) = \int p(\phi_1, t_1|\phi, t) p(\phi, t|\phi_0, t_0) \sqrt{g} d\phi \quad (5.106)$$

Realizando la parcial con respecto al tiempo  $t$  de la expresión anterior se demuestra que:

$$\int \frac{\partial p(\phi_1, t_1|\phi, t)}{\partial t} p(\phi, t|\phi_0, t_0) \sqrt{g} d\phi + \int p(\phi_1, t_1|\phi, t) \frac{\partial p(\phi, t|\phi_0, t_0)}{\partial t} \sqrt{g} d\phi = 0 \quad (5.107)$$

donde se introduce la ecuación de Smoluchowski dada por [Ec.5.96], entonces:

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial p(\phi_1, t_1|\phi, t)}{\partial t} p(\phi, t|\phi_0, t_0) \sqrt{g} d\phi = \\ - D_{eff} \int p(\phi_1, t_1|\phi, t) \Delta_M p(\phi, t|\phi_0, t_0) \sqrt{g} d\phi \end{aligned} \quad (5.108)$$

Al realizar integral por partes de lado derecho de esta última expresión (dos veces) se demuestra que:

$$\int p(\phi_1, t_1|\phi, t) \Delta_M p(\phi, t|\phi_0, t_0) \sqrt{g} d\phi = \int p(\phi, t|\phi_0, t_0) \Delta_M^\dagger p(\phi_1, t_1|\phi, t) \sqrt{g} d\phi \quad (5.109)$$

donde  $\Delta_M^+$  es el operador adjunto de Laplace-Beltrami .

Sin embargo como podemos observar que

$$\Delta_M^+ = \Delta_M$$

es decir, el operador de Laplace-Beltrami es autoadjunto.

Por otro lado, al reemplazar [Ec.5.109] en [Ec.5.108] tenemos

$$\int \left( \frac{\partial p(\phi_1, t_1 | \phi, t)}{\partial t} + D_{eff} \Delta_M^+ p(\phi_1, t_1 | \phi, t) \right) p(\phi, t | \phi_0, t_0) \sqrt{g} d\phi = 0 \quad (5.110)$$

lo que implica que:

$$\frac{\partial p(\phi_1, t_1 | \phi, t)}{\partial t} + D_{eff} \Delta_M^+ p(\phi_1, t_1 | \phi, t) = 0 \quad (5.111)$$

sea la ecuación *backward* de Smoluchowski para una ABP, y tal como lo dice su nombre, esta ecuación nos muestra cómo evoluciona el proceso estocástico de reversa, es decir, como evoluciona la condicional de la función de densidad de probabilidad.

Recalcamos que  $\Delta_M^+$  opera sobre las variables no condicionadas, y esto será lo que nos permitirá introducirla en nuestra definición del MFPT.

### 5.4.2. MFPT para ABP's

Continuemos nuestro análisis para poder obtener la ecuación del MFPT en 1 variedades.

Aprovechando que el operador adjunto del operador de Beltrami actúa sobre la condicional, y que el MFPT, es una función que depende de la variable condicionada, operamos el operador adjunto de Beltrami con este:

$$\Delta_M^+ \langle \tau(\phi_0) \rangle = \int_0^\infty \int_{\phi_2}^{\phi_1} \Delta_M^+ p(\phi, \tau | \phi_0, 0) \sqrt{g} d\phi d\tau \quad (5.112)$$

El operado se introduce en el integrando debido a que opera sobre  $\phi_0$ , que es el condicional.

Al utilizar la backward Smoluchowski equation tenemos que:

$$\Delta_M^+ \langle \tau(\phi_0) \rangle = -\frac{1}{D_{eff}} \int_0^\infty \int_{\phi_2}^{\phi_1} \frac{\partial p(\phi, \tau | \phi_0, t_0)}{\partial t_0} \Big|_{t_0=0} \sqrt{g} d\phi d\tau \quad (5.113)$$

Pero veamos, dado que el tiempo  $t_0 = 0$ , entonces es válido escribir la siguiente igualdad:

$$p(\phi, t|\phi_0, t_0) = p(\phi, t - t_0|\phi_0, 0)$$

Entonces es posible demostrar con esta definición que

$$\left. \frac{\partial p(\phi, \tau|\phi_0, t_0)}{\partial t_0} \right|_{t_0=0} = - \frac{\partial p(\phi, \tau|\phi_0, 0)}{\partial(\tau)} \quad (5.114)$$

es decir, podemos pasar de derivadas parciales con respecto al parámetro no condicionado  $t_0$  a derivadas parciales del parámetro temporal condicionado  $\tau$ .

Al sustituir en nuestra definición del MFPT la [Ec.5.113] podemos fácilmente verificar que:

$$\Delta_M^+ \langle \tau(\phi_0) \rangle = - \frac{1}{D_{eff}} \quad (5.115)$$

será la ecuación que rige el MFPT para 1-Variedades Riemannianas cuya solución está sujeta bajo las condiciones de frontera:

$$\langle \tau(\phi_1) \rangle = 0 \quad ; \quad \langle \tau(-\phi_1) \rangle = 0 \quad (5.116)$$

donde recordemos

$$\Delta_M^+ = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \phi_0} \left( \sqrt{g} g^{\phi\phi} \frac{\partial}{\partial \phi_0} \right)$$

Nótese que dichas condiciones de frontera [Ec.5.116] son de Dirichlet, que en nuestro caso, representan a las barreras absorbentes puestas en los ángulos  $\phi_1$  y  $-\phi_1$ . Dichas condiciones de frontera, junto con la ecuación [Ec.5.115], forman un problema de primer paso, análogo al problema de primer paso de una partícula libre Browniana en el espacio plano, véase por ejemplo [16].

Por lo tanto, la ecuación ordinaria de segundo orden [Ec.5.115] caracteriza el MFPT de un modelo de ABP's en cualquier curva plana con métrica, sin embargo, nótese que se encuentra en su forma backward, es decir, que mide el tiempo partiendo el sistema desde el punto de absorción, y no de la posición inicial de las partículas.

Para verificar nuestra expresión teórica [Ec.5.115] para el MFPT de ABP's moviéndose sobre una curva plana, compararemos el resultado de ésta con

el promedio numérico de un ensamble de ABP's a partir de la simulación de la dinámica de Langevin de nuestro modelo de ABP. Para ello, hemos seleccionado 3 geometrías planas particulares: circunferencia, elipse, y limaçon de segunda especie.

Los parámetros los hemos tomado de algunos experimentos previos reportados en la literatura [24] [26] [22] [15], donde  $D_B = 0,22\mu m^2/s$ ,  $D_R = 0,16s^{-1}$ , son los coeficientes de difusión traslacional, y rotacional, respectivamente. Por otro lado, el incremento temporal considerado es de  $\Delta t = 0,1s$ , junto con 2000 realizaciones por cada ángulo de absorción  $\phi$  elegido. Además, consideramos las condiciones iniciales  $(\phi_0, \alpha_0) = (0, 0)$ , donde recordemos que  $\alpha$  es el ángulo asociado al vector director de nuestra ABP. Primero veremos el efecto geométrico que existe en el MFPT, para ello, analizaremos nuestras geometrías particulares para el caso  $U = 4\mu m/s$ . Tomaremos una longitud de arco constante igual al de una circunferencia de  $R = 200\mu m$  y la deformaremos para poder formar una elipse y un limaçon de segunda especie. La parametrización de la elipse viene dada por  $\mathbf{r} = (a \cos \phi, b \sin \phi)$ , y la del limaçon de segunda especie por  $\mathbf{r} = (r(\phi) \cos \phi, r(\phi) \sin \phi)$  donde  $r(\phi) = a + b \cos(2\phi)$  con  $a = 2b$ . Recordemos que  $\phi$  es el ángulo asociado al movimiento del centro de masa de nuestra ABP y que el perímetro de cualquier 1-variedad Riemanianna es dado por  $S = \int_0^{2\pi} \sqrt{g_{\phi\phi}(\phi)}$ , donde  $g_{\phi\phi}(\phi) = \mathbf{e}_\phi \cdot \mathbf{e}_\phi$  es el elemento  $\phi\phi$  de la métrica y  $\mathbf{e}_i = \partial\mathbf{r}/\partial x^i$ . Entonces, a partir de integración numérica podemos determinar de manera aproximada los parámetros fijos (a,b) para las parametrizaciones, de las geometrías, antes mencionadas formadas por un lazo de longitud  $L = 2\pi R$  con  $R = 200\mu m$ . Para el caso de la elipse se tiene entonces que  $(a, b) = (290,5; 78,5)\mu m$  con  $e \approx 0,96$ , mientras que para el limaçon de segunda especie los parámetros correspondientes son  $(a, b) = (163,2; 81,5)\mu m$ .

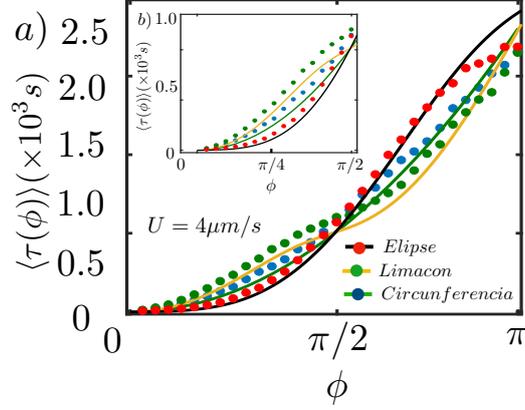


Figura 5.5: MFPT para tres geometrías distintas: teoría en líneas punteadas, y simulaciones en puntos sólidos. Elipse en color rojo, limaçon en verde y circunferencia en azul. Las tres geometrías tienen el mismo perímetro  $L = 2\pi R$  con  $R = 200\mu\text{m}$ , velocidad de nado  $U = 5\mu\text{m/s}$ ,  $D_R = 0,16\text{s}^{-1}$  y  $D_B = 0,22\mu\text{m}^2/\text{s}$ . 2000 realizaciones. *a)* MFPT para ángulos entre  $[0 - \pi]$ , *b)* Una ampliación de 5.5*a)* para ángulos entre  $[0 - \pi/2]$

La figura 5.5 muestra una gran compatibilidad entre resultados teóricos dados por nuestra expresión [Ec.5.115], y las simulaciones de las ecuaciones de Langevin del sistema. El efecto de la geometría es evidente, pues ésta altera el MFPT dependiendo de la curvatura de la misma. Por ejemplo, en el caso de ABP's moviéndose sobre una circunferencia, (Línea punteada en rojo), el MFPT es creciente con respecto al ángulo de partida. Dado que para la circunferencia  $g_{\phi\phi} = R^2$  con  $R = \text{cte}$ , y que  $g = g_{\phi\phi}$ , podemos demostrar que  $\langle \tau(\phi) \rangle = R^2 \phi^2 / 2D_{\text{eff}}$  donde  $D_{\text{eff}} = D_B + U^2 / 2D_R$ , entonces, es evidente que en este caso particular  $\langle \tau(\phi_2) \rangle > \langle \tau(\phi_1) \rangle$  para  $\phi_2 > \phi_1$ . Sin embargo, en el caso de una geometría con curvatura  $k \neq \text{cte}$ , el MFPT no sigue la misma tendencia. Para ángulos menores a  $\pi/2$  el MFPT en el caso de ABP's sobre un limaçon de segunda especie (línea punteada en azul) es creciente, y mayor, con respecto al MFPT de una circunferencia con mismo perímetro. Justo en  $\pi/2$  existe un punto de inflexión, donde la pendiente del crecimiento del MFPT decae, para posteriormente, incrementarse. Sin embargo, este cambio en la gráfica, hace que el MFPT para ángulos mayores a  $\pi/2$  sea menor al que ocurre para la circunferencia. El mismo comportamiento se observa en el caso de la elipse (línea punteada en verde), sin embargo en este caso, para ángulos menores a  $\pi/2$ , el MFPT es más corto que en el caso de la circunferencia, mientras que para ángulos mayores a  $\pi/2$  este tiempo es mayor. Nótese, que justo en  $\pi/2$ , donde ocurre el cambio de comportamiento, el MFPT para las tres geometrías se cruza, es decir, sin importar la geometría, el tiempo

promedio que tarda la ABP en llegar a  $\pi/2$  es el mismo. Este resultado es importante, pues, si quisiéramos saber el MFPT de llegar a un ángulo  $\pi/2$  (dado que partió de  $\phi_0 = 0$ ) para alguna geometría más complicada, podríamos hallar que este tiempo sería igual al MFPT que tardaría una ABP's en llegar al mismo ángulo pero sobre una circunferencia con el mismo perímetro. Podríamos realizar simulaciones para un mayor número de realizaciones, e intervalos de integración  $\Delta t$  menores, para mejorar el ajuste de datos con la teoría. Sin embargo, es evidente que la teoría muestra correctamente el comportamiento del MFPT de ABP's en curvas planas.

Ahora veremos cuál es el efecto de la propulsión en el MFPT, manteniendo los mismos parámetros del sistema, y los mismos valores característicos de las geometrías, pero esta vez variando la velocidad de nado. Las velocidades de autopropulsión consideradas son  $U = \{1, 3, 5, 8\} \mu m/s$ . Los resultados los hemos graficado en la figura 5.6. En líneas sólidas la solución teórica [Ec.5.115], mientras que datos de la dinámica de Langevin en círculos sólidos. Figuras 5.6a)-c) muestran una gran concordancia entre teoría y simulación, por lo que nuestra expresión [Ec.5.115] muestra una gran capacidad para predecir el MFPT para ABP's sobre alguna 1-variedad Riemanianna. En el ángulo  $\phi = \pi/2$  podemos notar como en el caso del limaçon el MFPT muestra una disminución en su tasa de crecimiento. Ello es debido a que la partícula tarda en promedio más tiempo en salir en de la zona con menor radio de curvatura que de las zonas con mayor radio de curvatura. Recuerde que la dinámica de las partículas es gobernada por las ecuaciones de Langevin 5.37-5.38 y que éstas contienen información acerca de la curvatura de la geometría, pues recordemos que están asociadas al plano tangente instantáneo sobre el cual la partícula vive en cada instante. En el caso de la elipse ocurre lo mismo, para el caso  $\pi/2$ , sólo que ahora al ser este ángulo asociado a la zona de mayor radio de curvatura, el MFPT tiende a ser crecer más rápido, mientras que en los extremos de la geometría,  $0$  y  $\pi$ , el MFPT muestra un decrecimiento, asociado a que son zonas de menor radio de curvatura. La explicación de nuevo está relacionada con el efecto de la curvatura en la dinámica de las partículas. También podemos observar que los tiempos del MFPT asociados a los ángulos  $\pi/2$  y  $\pi$  son independientes de la geometría cuando su perímetro es el mismo, la explicación podría ser que en las zonas de menor radio de curvatura, menor es el MFPT, mientras que en zonas de mayor radio de curvatura, mayor es el MFPT, de tal manera que el tiempo promedio de ir de  $\phi_0 = 0 - \pi/2$  o de  $\phi_0 = 0 - \pi$  es siempre el mismo, pues los aumentos y disminuciones del MFPT en cada zona, se compensan al final.

Finalmente, para verificar la teoría con el caso pasivo tomaremos velocidades de propulsión  $U < 1 \mu m/s$ , sin embargo, para que el tiempo de computo en las simulaciones no sea tan exigente tomaremos geometrías pequeñas, ya

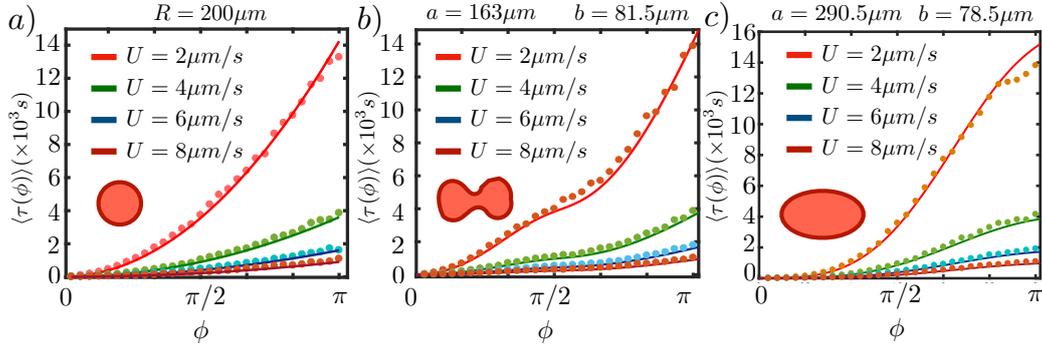


Figura 5.6: MFPT de partículas activas Brownianas que se restringen a moverse sobre curvas planas de perímetro  $L = 2\pi R$  donde  $R = 200\mu m$ . Se varía la velocidad de autopropulsión  $U$  para ver su efecto en el MFPT. ABP's sobre: a)circunferencia, b)limaçon de segunda especie, c)elipse.

que si tomáramos geometrías del orden de  $r = 200\mu m$  la longitud de arco que recorrer sería inmensa para una partícula casi pasiva, y dado que como puede verse en la expresión [Ec.5.115], para  $U < 1\mu m/s$ , el MFPT es muy grande (pues es inversamente proporcional al cuadrado de la velocidad de nado) con respecto a velocidades de nado  $U > 1\mu m/s$ , el tiempo de simulación sería muy grande. Entonces, tomaremos las mismas geometrías pero ahora formadas por un lazo de longitud igual a la de una circunferencia de radio  $R = 15\mu m$ . De ella formamos dos elipses, una con parámetros  $(a, b) = (22, 4)\mu m$  y  $e \approx 0,98$ , y la otra con parámetros  $(a, b) = (20, 15)\mu m$  y  $e \approx 0,66$ , y un limaçon con parámetros  $(a, b) = (12, 6)\mu m$ . Para la simulación mantendremos el mismo valor para el  $D_B$  y el  $D_R$ , el mismo tamaño de paso, y el mismo número de realizaciones. Las velocidades de autopropulsión consideradas son  $U = \{0, 0,2, 0,5\}\mu m/s$ . Los resultados podemos visualizarlos en la figura 5.7. De nuevo, existe una gran concordancia entre teoría y simulación. La razón de no emplear geometrías pequeñas en el caso de velocidades de nado  $U > 1\mu m/s$ , es que la partícula va tan rápido, con respecto al caso pasivo (donde los tiempos del MFPT, por ejemplo figura 5.7 a), son a la escala de  $\times 10^3$ ), que la expresión teórica [Ec.5.115] para el MFPT no es válida, pues no se cumple la condición  $\tau \gg D_R$ . Para que sea válida es necesario aumentar el espacio donde la partícula pueda desplazarse.

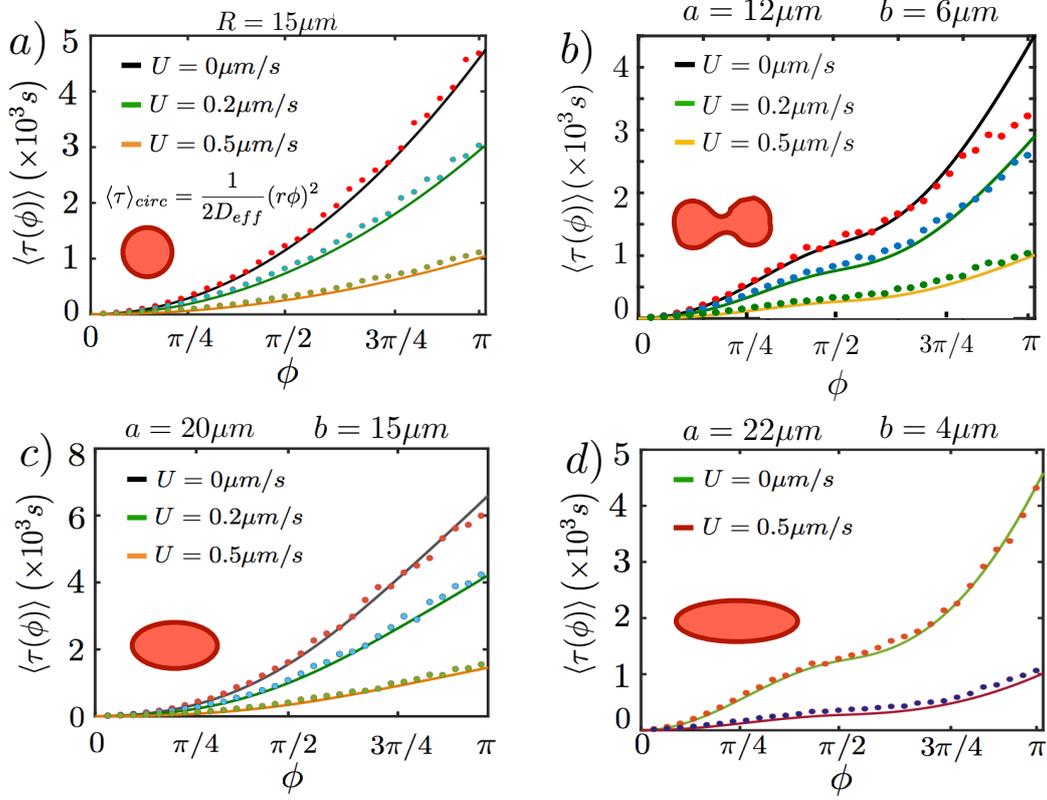


Figura 5.7: MFPT para partículas activas Brownianas con velocidad de autopropulsión  $U < 1 \mu\text{m/s}$ . Las partículas parten de un ángulo  $\phi_0 = 0$  y son absorbidas en  $\phi$ .

Es muy importante recalcar que la investigación en torno al movimiento Browniano sobre superficies ha ido evolucionando muy lentamente debido a la complejidad matemática, y lógica, con respecto a los procesos en espacios planos. A pesar de ello, hemos obtenido una interesante aplicación del modelo de materia activa en superficies Riemmanianas <sup>4</sup>, al adaptar metodologías ya bien establecidas para el estudio de materia activa en espacios planos, para resolver el problema de primer paso de partículas activas en curvas planas. Otro punto importante a destacar es el hecho de que en el estudio de procesos de primer paso aún no existen metodologías bien establecidas para abordar de manera generalizada problemas como el MFPT. Por lo que, la metodología aquí propuesta, ha sido desarrollada, e inspirada, de varios trabajos y libros.

Por otro lado, dado que uno de los pocos trabajos del MFPT de partículas activas en espacios planos es el desarrollado por A.Scacchi y A.Sharma [37], hemos considerado, al igual que ellos, la aproximación a tiempos  $t \gg 1/D_R$

<sup>4</sup>Modelo caracterizado en [2]).

del proceso. Si bien, esto hace que perdamos información acerca del inicio del proceso, no hace que nuestro resultado no sea interesante, pues, como he comentado, los tiempos de primer paso dependerán tanto del espacio en el que la partícula pueda desplazarse, como de la velocidad de nado de la misma, y por lo tanto, nuestra expresión teórica se ajustará muy bien para los casos donde se cumpla la condición  $t \gg 1/D_R$ .

Finalmente, sería interesante que en algún momento se puedan realizar experimentos para verificar si la expresión [Ec.5.115] describe de manera real el MFPT de partículas activas. También, de manera teórica, queda la posibilidad de generalizar el resultado para superficies Riemmanianas, donde, la metodología que hemos desarrollado aquí puede que ayude a lograrlo. Dado que estos resultados no han sido reportados en la literatura, se ha decidido escribir un artículo para su posterior publicación, anexaremos la portada del mismo en un documento adjunto.

# Capítulo 6

## Conclusión general

Dada la importancia, y relevancia, del estudio de sistemas activos en los últimos años, podemos decir que hemos puesto un granito de arena en resolver problemas típicos en sistemas estocásticos para el modelo más estudiado de materia activa. Recordemos que abordar los problemas ya resueltos para el caso pasivo, como por ejemplo la función de distribución de velocidades de Maxwell-Boltzmann (S.XIX), pero para el sistema dotado de actividad e inercia rotacional, son de vital importancia, ya que estas características hacen que las propiedades, de este tipo de materia, cambien de manera contundente, propiedades que han ido comprobado poco a poco experimentalmente, tal como la presión de Reynolds [43], presión que está asociada a una contribución debido a la Inercia de la partícula. Haber hallado un método bien descrito en este trabajo para abordar la ecuación de Fokker-Planck para nuestro modelo de materia activa ha sido muy relevante, pues, a pesar de no poder resolver de manera exacta dicha ecuación, pudimos demostrar a partir de este formalismo, que la inercia rotacional realmente contribuye a las cantidades medibles experimentalmente, tal como en el MSS. Todo esto es de ayuda para que en el futuro exista una teoría completa para este tipo de sistemas, una teoría análoga a la que existe, hoy en día, para comprender los sistemas pasivos en equilibrio. Por otro lado, también hemos empleado un modelo de ABP's para espacios no planos que había sido antes estudiado para hallar cantidades tales como el MSD o la varianza [19], [2], pero ahora para hallar una cantidad como lo es el MFPT, una cantidad asociada a un problema que aún hasta nuestros días no tiene una metodología bien definida para encontrarla, pero para la cuál hemos empleado recursos de anteriores trabajos, y analogías con el espacio plano para hallar una ecuación diferencial de segundo orden que lo describa de manera satisfactoria, sin olvidar, que nuestros resultados teóricos han sido consistentes con simulaciones numéricas. Además, es importante destacar que ambos temas de investigación en

un futuro pueden ser retomados para poder generalizarse a más dimensiones, por ejemplo, el caso de la distribución de M.B., para generalizarse a 2D, y en el caso del MFPT, para estudiarlo en superficies Riemannianas. Finalmente, destacando que como resultado de dicho esfuerzo pudimos publicar con éxito, hasta el momento, uno de los temas abordado en esta tesis, por lo cual, podemos decir que ha dado frutos nuestra dedicación. Sin más por añadir, Muchas gracias por el tiempo dedicado a leer este trabajo.

A handwritten signature in black ink, appearing to read "Pedro Herrera S.A.", written in a cursive style.

Atte: Fis. Pedro Herrera

# Capítulo 7

## Apéndices

### 7.1. Apéndices A: Ecuaciones ordinarias

#### 7.1.1. $A_1$

Resolveremos 1.19 bajo la condición inicial 1.20.  
Veamos:

$$\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} = -Dk^2 \tilde{\rho} \quad (7.1)$$

cuya solución viene dada por:

$$\tilde{\rho} = A \exp(-Dk^2 t) \quad (7.2)$$

donde  $A = cte.$

al hacer la transformación al espacio de Fourier de la condición inicial 1.20 tenemos que:

$$\tilde{\rho}(x, 0) = M \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - 0) e^{ikx} dx = M \quad (7.3)$$

Entonces al aplicar a 7.2 obtenemos:

$$\tilde{\rho} = M \exp(-Dk^2 t) \quad (7.4)$$

Regresamos al espacio Real empleando la transformación inversa de Fou-

rier dada por:

$$\begin{aligned}
 \rho &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\rho} e^{-ikx} dk \\
 &= \frac{M}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dk^2t} e^{-ikx} dk \\
 &= \frac{M}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}
 \end{aligned} \tag{7.5}$$

entonces la densidad de probabilidad de partículas vendrá dada por:

$$\rho = \frac{M}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \tag{7.6}$$

### 7.1.2. $A_2$

veamos

$$\frac{1}{2}m \frac{d^2}{dt^2} \langle x^2 \rangle - mk_B T = -\frac{1}{2}\gamma \frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle \tag{7.7}$$

es una ecuación inhomogénea de segundo grado cuya solución se compone de la suma de la solución particular con la homogénea, donde la ecuación homogénea viene dada por:

$$\frac{1}{2}m \frac{d^2}{dt^2} \langle x^2 \rangle + \frac{1}{2}\gamma \frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle = 0 \tag{7.8}$$

cuyo polinomio característico viene dado por:

$$q^2 + \frac{\gamma}{m}q = 0 \tag{7.9}$$

y por lo tanto la solución homogénea es:

$$\langle x^2 \rangle = A + B e^{-\frac{\gamma}{m}t} \tag{7.10}$$

dado que la parte inhomogénea es una constante, se propone una solución lineal de la forma

$$\langle x^2 \rangle_p = Cte * t \tag{7.11}$$

sustituyendo en 7.7 podemos verificar que la solución exacta a la misma viene dada por:

$$\langle x^2 \rangle = A + B e^{-\frac{\gamma}{m}t} + \frac{2mk_B T}{\gamma} t \tag{7.12}$$

### 7.1.3. $A_3$

Sea

$$m\dot{v} = -\gamma v + \xi(t) \quad (7.13)$$

una ecuación inhomogénea de primer grado, cuya solución se forma de la suma de una solución particular y una solución homogénea, cuya ecuación viene dada por:

$$m\dot{v} = -\gamma v \quad (7.14)$$

cuya solución, trivial, es:

$$v(t) = v_0 e^{-\frac{\gamma}{m}t} \quad (7.15)$$

proponemos que la solución general sea de la forma:

$$v(t) = v_0 e^{-\frac{\gamma}{m}t} + e^{-\frac{\gamma}{m}t} f(t) \quad (7.16)$$

que al introducir en 7.13 nos lleva a una ecuación para  $f(t)$

$$\frac{df(t)}{dt} = \frac{1}{m} e^{\frac{\gamma}{m}t} \xi(t) \quad (7.17)$$

cuya solución es instantánea y viene dada por:

$$f(t) = \frac{1}{m} \int_0^t e^{\frac{\gamma}{m}t'} \xi(t') dt' \quad (7.18)$$

al sustituir en 7.16 nos lleva al resultado 2.5

Por otro lado, al integrar 2.5 con respecto al tiempo tenemos que:

$$\begin{aligned} x(t) - x_0 &= v_0 \int_0^t e^{-\frac{\gamma}{m}t'} dt' + \frac{1}{m} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} e^{-\frac{\gamma}{m}(t_1-t_2)} \xi(t_2) dt_2 \\ &= \frac{mv_0}{\gamma} \left(1 - e^{-\frac{\gamma}{m}t}\right) + \frac{1}{m} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} e^{-\frac{\gamma}{m}(t_1-t_2)} \xi(t_2) dt_2 \end{aligned} \quad (7.19)$$

donde

$$\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} e^{-\frac{\gamma}{m}(t_1-t_2)} \xi(t_2) dt_2 = \int_0^t e^{-\frac{\gamma}{m}t_1} \left[ \int_0^{t_1} e^{\frac{\gamma}{m}t_2} \xi(t_2) dt_2 \right] dt_1 \quad (7.20)$$

donde al integrar por partes, y al haber empleado el Teorema Fundamental del Cálculo, podemos verificar que:

$$\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} e^{-\frac{\gamma}{m}(t_1-t_2)} \xi(t_2) dt_2 = \frac{m}{\gamma} \int_0^t \left( 1 - e^{-\frac{\gamma}{m}(t-t_1)} \right) \xi(t_1) dt_1 \quad (7.21)$$

que al sustituir en 7.19 obtenemos la expresión 2.6

## 7.2. Apéndice B: Condiciones iniciales

Recordemos, la condición inicial a nuestro problema viene dado por

$$P(v, \Omega, \varphi, 0 | v_0, \Omega_0, \varphi_0, 0) = \delta(v - v_0) \delta(\Omega - \Omega_0) \frac{1}{2\pi} \quad (7.22)$$

Entonces para conocer la correspondiente condición inicial para cada uno de nuestros  $\tilde{p}_n$  es necesario recordar la definición

$$\tilde{P}_n(u, \varphi, t) = e^{\frac{Du^2}{2\beta m^2}(1-e^{-2\beta t})} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{P}(\Omega, u, \varphi, t) \frac{\psi_n}{\psi_0} d\Omega \quad (7.23)$$

donde la transformación de Fourier de 7.22 nos lleva a :

$$\tilde{P}(\Omega, u, \varphi, 0) = \frac{e^{-iuv_0}}{2\pi} \delta(\Omega - \Omega_0) \quad (7.24)$$

### 7.2.1. n=0

veamos, tomamos n=0

$$\begin{aligned} \tilde{P}_0(u, \varphi, 0) &= \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{P}(\Omega, u, \varphi, 0) \frac{\psi_0}{\psi_0} d\Omega \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{P}(\Omega, u, \varphi, 0) d\Omega \\ &= \frac{e^{-iuv_0}}{2\pi} \end{aligned} \quad (7.25)$$

### 7.2.2. n=1

$$\begin{aligned}
\tilde{P}_1(u, \varphi, 0) &= \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{P}(\Omega, u, \varphi, 0) \frac{\psi_1}{\psi_0} d\Omega \\
&= \frac{1}{\Omega_a} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{P}(\Omega, u, \varphi, 0) \Omega d\Omega \\
&= \frac{e^{-iuv_0}}{2\pi\Omega_a} \int_{-\infty}^{\infty} \Omega \delta(\Omega - \Omega_0) d\Omega \\
&= \frac{\Omega_0}{2\pi\Omega_a} e^{-iuv_0}
\end{aligned} \tag{7.26}$$

donde

$$\frac{\psi_1}{\psi_0} = \frac{1}{\sqrt{2}} H_1 \left( \frac{\Omega}{\sqrt{2}\Omega_a} \right)$$

y

$$H_1 \left( \frac{\Omega}{\sqrt{2}\Omega_a} \right) = 2 \frac{\Omega}{\sqrt{2}\Omega_a} = \frac{\sqrt{2}\Omega}{\Omega_a}$$

Tomando como  $\Omega_0 = 0$  tenemos que:

$$\tilde{P}_1(u, \varphi, 0) = 0 \tag{7.27}$$

### 7.2.3. n=2

$$\begin{aligned}
\tilde{P}_2(u, \varphi, 0) &= \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{P}(\Omega, u, \varphi, 0) \frac{\psi_2}{\psi_0} d\Omega \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{e^{-iuv_0}}{2\pi} \left( \frac{\Omega_0^2}{\Omega_a^2} - 1 \right)
\end{aligned} \tag{7.28}$$

donde

$$\frac{\psi_2}{\psi_0} = \frac{1}{2\sqrt{2}} H_2 \left( \frac{\Omega}{\sqrt{2}\Omega_a} \right)$$

y

$$H_2 \left( \frac{\Omega}{\sqrt{2}\Omega_a} \right) = 2 \frac{\Omega^2}{\Omega_a^2} - 2$$

Tomando como  $\Omega_0 = 0$  tenemos que:

$$\tilde{P}_2(u, \varphi, 0) = -\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{e^{-iuv_0}}{2\pi} \tag{7.29}$$

### 7.3. Apéndice C: Símbolos de Christoffel

El símbolo de Christoffel de 2da especie se define como:

$$\Gamma_{bc}^a = \frac{1}{2} g^{aj} \left( \frac{\partial g_{jb}}{\partial x^c} + \frac{\partial g_{jc}}{\partial x^b} - \frac{\partial g_{bc}}{\partial x^j} \right) \quad (7.30)$$

donde  $g_{ab}$  son los elementos de la Métrica  $\mathbb{G}$ , y  $g^{ab}$  los elementos de la métrica inversa  $\mathbb{G}^{-1}$ , definidos por:

$$g_{ab} = \mathbf{e}_a \cdot \mathbf{e}_b \quad (7.31)$$

$$g^{ab} = \mathbf{e}^a \cdot \mathbf{e}^b \quad (7.32)$$

entonces tenemos que usando 7.31, 7.32 y la propiedad

$$\frac{\partial \mathbf{e}_i}{\partial x^j} = \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial x^j \partial x^i} = \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial x^i \partial x^j} = \frac{\partial \mathbf{e}_j}{\partial x^i} \quad (7.33)$$

podemos reescribir 7.30 como

$$\Gamma_{bc}^a = \mathbf{e}^a \cdot \frac{\partial \mathbf{e}_b}{\partial x^c} = \mathbf{e}^a \cdot \frac{\partial \mathbf{e}_c}{\partial x^b} \quad (7.34)$$

por otro lado, si  $\mathbb{G}$  es diagonal<sup>1</sup>, usando la definición 7.30, se demuestra fácilmente que:

$$\Gamma_{bc}^a = 0, a \neq b \neq c \quad (7.35)$$

$$\Gamma_{ab}^a = \Gamma_{ba}^a = \frac{1}{2} \frac{1}{g_{aa}} \frac{\partial g_{aa}}{\partial x^b}, a \neq b \quad (7.36)$$

$$\Gamma_{bb}^a = -\frac{1}{2} \frac{1}{g_{aa}} \frac{\partial g_{bb}}{\partial x^a}, a \neq b \quad (7.37)$$

---

<sup>1</sup>La condición suficiente y necesaria para que ocurra es que el espacio tangente se forme con una base ortogonal de vectores  $\mathbf{e}_i$

$$\Gamma_{aa}^a = \frac{1}{2} \frac{1}{g_{aa}} \frac{\partial g_{aa}}{\partial x^a} \quad (7.38)$$

por otro lado, si

$$\mathbf{r}(x^a, x^c) = (f(x^a), g(x^a), x^c), a \neq c \quad (7.39)$$

entonces

$$\mathbf{e}_a(x^a) = (f'(x^a), g'(x^a), 0) \Rightarrow g_{aa} = h(x^a) \quad (7.40)$$

$$\mathbf{e}_c = (0, 0, 1) \Rightarrow g_{cc} = 1 \quad (7.41)$$

y por lo tanto, la única expresión no nula del conjunto 7.35 al 7.38, será

$$\Gamma_{aa}^a = \frac{1}{2} \frac{1}{g_{aa}} \frac{\partial g_{aa}}{\partial x^a} \quad (7.42)$$

## 7.4. Apéndice D: Conexión entre Ito y Stratonovich

la conexión entre Ito y Stratonovich viene dada por

$$m_s^i = m^i - \frac{1}{2} \sigma_j^k \frac{\partial \sigma_j^i}{\partial x^k} \quad (7.43)$$

para la ecuación general de la forma

$$dx^i = \sigma_k^i \oplus d\beta^k + m_s^i dt \quad (7.44)$$

y su correspondiente ecuación de FP en el esquema de Stratonovich será

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial x^i} \left[ \left( m_s^i + \frac{1}{2} \sigma_j^k \frac{\partial \sigma_j^i}{\partial x^k} \right) \sqrt{g} P \right] = \frac{1}{2\sqrt{g}} \frac{\partial^2}{\partial x^i \partial x^j} \left[ \sqrt{g} \sigma_k^i \sigma_k^j P \right] \quad (7.45)$$

donde  $\oplus$  denota que el ruido está considerado en el esquema de Stratonovich.

# Bibliografía

- [1] A.EINSTEIN. On the movement of small particles suspended in stationary liquids required by the molecular-kinetic theory of heat. *Annalen der Physik* 17 (1905), 549–560.
- [2] APAZA, L., AND SANDOVAL, M. Active matter on riemannian manifolds. *Soft Matter* 14 (2018).
- [3] BASKARAN, A., AND MARCHETTI, M. C. Enhanced diffusion and ordering of self-propelled rods. *Phys. Rev. Lett.* 101 (Dec 2008), 268101.
- [4] BASKARAN, A., AND MARCHETTI, M. C. Nonequilibrium statistical mechanics of self-propelled hard rods. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* 2010, 04 (apr 2010), P04019.
- [5] BECHINGER, C., LEONARDO, R. D., LOWEN, H., REICHHARDT, C., VOLPE, G., AND VOLPE, G. Active brownian particles in complex and crowded environments. *Rev. Mod. Phys.* (2016).
- [6] BOLTZMANN, L. Über die beziehung zwischen dem zweiten hauptsatz der mechanischen wärmetheorie und der wahrscheinlichkeitsrechnung respektive den satzen über das wärmegleichgewicht. *Sitzungsberichte der Kaiserlichen Akademie der Wissenschaften in Wien, Mathematisch-Naturwissenschaftliche Classe* 76 (1877), 373–435.
- [7] BROWN, R. On the particles contained in the pollen of plants; and on the general existence of active molecules in organic and inorganic bodies. *1827* 2 (1827), 466–467.
- [8] CHATE, H. Dry aligning dilute active matter. *Annual Review of Condensed Matter Physics* 11, 1 (2020), 189–212.
- [9] COFFEY, W., KALMIKOV, Y., AND VALDRON, Y. *The Langevin equation: with applications in physics, chemistry and electrical engineering*. World Scientific, NJ USA, 1996.

- [10] DESEIGNE, J., DAUCHOT, O., AND CHATÉ, H. Collective motion of vibrated polar disks. *Phys. Rev. Lett.* *105* (Aug 2010), 098001.
- [11] DI LEONARDO, R., ANGELANI, L., DELL'ARCIPRETE, D., RUOCO, G., IEBBA, V., SCHIPPA, S., CONTE, M. P., MECARINI, F., DE ANGELIS, F., AND DI FABRIZIO, E. Bacterial ratchet motors. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* *107*, 21 (2010), 9541–9545.
- [12] EINSTEINPAPERS. <https://einsteinpapers.press.princeton.edu/vol2-trans/143>.
- [13] ENCULESCU, M., AND STARK, H. Active colloidal suspensions exhibit polar order under gravity. *Phys. Rev. Lett.* *107* (Jul 2011), 058301.
- [14] FRANCISCO SEVILLA, S. M. Smoluchowski diffusion equation for active brownian swimmers. *Physical Review E* *91* (2015).
- [15] G. VOLPE, I. BUTTINONI, D. V. H. K., AND BECHINGER, C. *Soft Matter* *7* (2011).
- [16] GARDINER, C. *Handbook of stochastic methods for Physics, Chemistry and the Natural Sciences*. Springer Series, 1985.
- [17] GINOT, F., THEURKAUFF, I., LEVIS, D., YBERT, C., BOCQUET, L., BERTHIER, L., AND COTTIN-BIZONNE, C. Nonequilibrium equation of state in suspensions of active colloids. *Phys. Rev. X* *5* (Jan 2015), 011004.
- [18] GOMPPER, G., WINKLER, R. G., SPECK, T., SOLON, A., NARDINI, C., PERUANI, F., LÄUWEN, H., GOLESTANIAN, R., KAUPP, U. B., ALVAREZ, L., KIØRBOE, T., LAUGA, E., POON, W. C. K., DESIMONE, A., MUIÑOS-LANDIN, S., FISCHER, A., SÄÜKER, N. A., CICHOS, F., KAPRAL, R., GASPARD, P., RIPOLL, M., SAGUES, F., DOOST-MOHAMMADI, A., YEOMANS, J. M., ARANSON, I. S., BECHINGER, C., STARK, H., HEMELRIJK, C. K., NEDELEC, F. J., SARKAR, T., ARYAKSAMA, T., LACROIX, M., DUCLOS, G., YASHUNSKY, V., SILBERZAN, P., ARROYO, M., AND KALE, S. The 2020 motile active matter roadmap. *Journal of Physics: Condensed Matter* *32*, 19 (feb 2020), 193001.
- [19] HERRERA, PEDRO, A. L., AND SANDOVAL, M. One-dimensional displacement of active matter on curved substrates. *Molecular Physics* *103* (2019).

- [20] HERRERA, P., AND SANDOVAL, M. Maxwell-boltzmann velocity distribution for noninteracting active matter. *Phys. Rev. E* 103 (2021), 012601.
- [21] HOWSE, J. R., JONES, R. A. L., RYAN, A. J., GOUGH, T., VAFA-BAKHSR, R., AND GOLESTANIAN, R. Self-motile colloidal particles: From directed propulsion to random walk. *Phys. Rev. Lett.* 99 (Jul 2007), 048102.
- [22] H.R. JIANG, N. Y., AND SANO, M. *Phys. Rev. Lett* 105 (2010).
- [23] HYPERPHYSICS. <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbasees/Kinetic/diffus.html#c4>.
- [24] J. PALACCI, S. SACANNA, A. S. E. *Science* 339 (2013), 936–940.
- [25] JESÚS SANTAMARÍA, A. *El movimiento Browniano: una paradigma de la materia blanda y de la biología*, vol. 106. 2013.
- [26] J.R. HOWSE, R.A.L. JONES, A. R. T. G. R., AND R.GOLESTANIAN. *Phys. Rev. Lett* 99 (2007).
- [27] KONOTOP, V. V., AND VÁZQUEZ, L. *Nonlinear Random Waves*. WORLD SCIENTIFIC, 1994.
- [28] KUDROLLI, A., LUMAY, G., VOLFSO, D., AND TSIMRING, L. S. Swarming and swirling in self-propelled polar granular rods. *Phys. Rev. Lett.* 100 (Feb 2008), 058001.
- [29] MARCHETTI, M. C., JOANNY, J. F., RAMASWAMY, S., LIVERPOOL, T. B., PROST, J., RAO, M., AND SIMHA, R. A. Hydrodynamics of soft active matter. *Rev. Mod. Phys.* 85 (Jul 2013), 1143–1189.
- [30] MAXWELL, J. C. Illustrations of the dynamical theory of gases. part i. on the motions and collisions of perfectly elastic spheres. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 19 (1860), 19–32.
- [31] NEEDLEMAN, D., AND DOGIC, Z. Active matter at the interface between materials science and cell biology. *Nat. Rev. Mat* 2 (2017), 2058–8437.
- [32] NORTON, M. M., BASKARAN, A., OPATHALAGE, A., LANGESLAY, B., FRADEN, S., BASKARAN, A., AND HAGAN, M. F. Insensitivity of active nematic liquid crystal dynamics to topological constraints. *Phys. Rev. E* 97 (Jan 2018), 012702.

- [33] PROST, J., JULICHER, F., AND JOANNY, J.-F. Active gel physics. *Nat. Phys.* *2* (2015), 1745–2481.
- [34] RISKEN, H., AND FRANK, T. *The Fokker-Planck Equation*. Springer, Berlin, Heidelberg, 1996.
- [35] SANDOVAL, M. Pressure and diffusion of active matter with inertia. *Phys. Rev. E* *101* (Jan 2020), 012606.
- [36] SANDOVAL, M., AND BRADY, J. F. Diffusion of active matter with inertia. In *APS March Meeting Abstracts* (Jan. 2019), vol. 2019 of *APS Meeting Abstracts*, p. H61.004.
- [37] SCACCHI, A., AND SHARMA, A. Mean first passage time of active brownian particle in one dimension. *Molecular Physics* *116*, 4 (2017), 460–464.
- [38] SCHOLZ, C., JAHANSHAH, S., LDOV, A., AND LÖWEN, H. Inertial delay of self-propelled particles. *Nat. Comm.* *9* (2018), 5156.
- [39] SHAEBANI, M. R., WYSOCKI, A., WINKLER, R. G., GOMPPER, G., AND RIEGER, H. Active gel physics. *Nat. Rev. Phys.* *2* (2020), 2522–5820.
- [40] SIDNEY, R. *A guide to first-passage processes*. 2001.
- [41] SOLON, A. P., FILY, Y., BASKARAN, A., CATES, M. E., KAFRI, Y., KARDAR, M., AND TAILLEUR, J. Pressure is not a state function for generic active fluids. *Nat. Phys.* *11* (2015), 673–678.
- [42] STENHAMMAR, J., TIRIBOCCHI, A., ALLEN, R. J., MARENDUZZO, D., AND CATES, M. E. Continuum theory of phase separation kinetics for active brownian particles. *Phys. Rev. Lett.* *111* (Oct 2013), 145702.
- [43] TAKATORI, S. C., YAN, W., AND BRADY, J. F. Swim pressure: Stress generation in active matter. *Phys. Rev. Lett.* *113* (2014).
- [44] THEURKAUFF, I., COTTIN-BIZONNE, C., PALACCI, J., YBERT, C., AND BOCQUET, L. Dynamic clustering in active colloidal suspensions with chemical signaling. *Phys. Rev. Lett.* *108* (Jun 2012), 268303.
- [45] TINGBO, HOU, H. Q. Continuous and discrete mexican hat wavelet transforms on manifolds. *Graphical Models* *74*, 4 (2012), 221–232.

- [46] VAN DER PAS, P. W. Tijdschrift voor de geschiedenis van de wetenschappen en de geneeskunde. *Scientiarum Historia* 13 (1971), 27–35.
- [47] VLADIMIR V. KONOTOP, E. Nonlinear random waves. *World Scientific* 17 (1905), 549–560.



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

# ACTA DE EXAMEN DE GRADO

No. 00108

Matrícula: 2192802503

Maxwell-Boltzmann velocity distribution for noninteracting active matter and the Mean-first passage time of active particles on curved substrates.



Con base en la Legislación de la Universidad Autónoma Metropolitana, en la Ciudad de México se presentaron a las 9:00 horas del día 17 del mes de diciembre del año 2021 POR VÍA REMOTA ELECTRÓNICA, los suscritos miembros del jurado designado por la Comisión del Posgrado:

DR. RODRIGO ANTONIO SOTO BERTRAN  
DR. MARIO SANDOVAL ESPINOZA  
DR. JOSE RAMON ALVARADO

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: PEDRO EMILIO HERRERA AVILA

PEDRO EMILIO HERRERA AVILA  
ALUMNO

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.

REVISÓ

MTRA. ROSALIA SERRANO DE LA PAZ  
DIRECTORA DE SISTEMAS ESCOLARES

DIRECTOR DE LA DIVISIÓN DE CBI

DR. JESUS ALBERTO OCHOA TAPIA

PRESIDENTE

DR. RODRIGO ANTONIO SOTO BERTRAN

VOCAL

DR. MARIO SANDOVAL ESPINOZA

SECRETARIO

DR. JOSE RAMON ALVARADO

El presente documento cuenta con la firma –autógrafa, 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