

Movimiento browniano activo mediante velocidades estocásticas

A. Castellanos-Moreno

Departamento de Física, Universidad de Sonora,
Apartado Postal 1626, Hermosillo Sonora, México. C. P. 83000.,
e-mail: acastell@fisica.uson.mx

Recibido el 15 de enero de 2003; aceptado el 14 de marzo de 2003

Se presenta una formulación del movimiento browniano activo a base de procesos estocásticos de un paso. Se hace un estudio de sus propiedades de estacionariedad y de equilibrio mediante la introducción de la entropía extendida, que permite definir una función del tiempo que se hace cero cuando el sistema físico alcanza el estado estacionario. También se recuperan las velocidades estocásticas para analizar el movimiento browniano activo y se encuentra que éstas son una herramienta teórica interesante que ayuda a distinguir, conceptualmente, el estado estacionario del estado de equilibrio. Este último existe cuando las velocidades de difusión y de escape se compensan. Además, permiten definir una velocidad angular del punto estado del sistema, que es distinto de cero cuando hay ausencia de balance detallado. El formalismo se ilustra mediante un ejemplo.

Descriptor: Procesos estocásticos; método de análisis estocástico; movimiento browniano; dinámica no lineal y sistemas dinámicos no lineales; cinética fuera de equilibrio.

A formalism based in one step stochastic processes to study active Brownian motion is developed in this paper. Stationary and equilibrium properties are treated by defining an extended entropy and by introducing an indicator function to know when stationary state is reached. Stochastic velocities are recovered as a theoretical tool to get insight about the difference between equilibrium and stationary states. An angular velocity is defined to show how its magnitude is different from zero when detailed balance is not accomplished. All the formalism is illustrated through an example.

Keywords: Stochastic processes; stochastic analysis methods; brownian motion; nonlinear dynamics and nonlinear dynamical systems; nonequilibrium kinetics.

PACS: 02.50.Ey; 05.10.Gg; 05.40.Jc; 05.45.-a; 82.20.Mj

1. Introducción

En este artículo se estudia el movimiento browniano activo (MBA) para mostrar un formalismo útil que permite construirlo sin postular ruidos *ad hoc*. Además, profundizamos en la comprensión del MBA haciendo uso de una herramienta matemática interesante que llamamos velocidades estocásticas.

El MBA es un conjunto de modelos introducidos en la literatura para estudiar sistemas “autopropulsados” en fisicoquímica [1-3] y en biología [4]. Esto se hace mediante la adición de un término nuevo a la bien conocida ecuación de Langevin, con lo cual se logra el tratamiento teórico de partículas que almacenan su propia energía [5]. El MBA es diferente del movimiento browniano pasivo (MBP) que es observado en las partículas que están inmersas en fluidos y que son muy grandes comparadas con la magnitud de los átomos que las rodean. El movimiento aleatorio que describen se debe a la combinación de dos efectos, que son:

- a) los impactos que reciben al azar por parte de las moléculas que forman al líquido o gas, y
- b) la fricción sobre la partícula cuando ésta se mueve a través del medio circundante.

Se le asigna el nombre de fricción pasiva para establecer la diferencia con el caso que sigue: si añadimos un tercer término a la ecuación de Langevin, uno puede pensar en partículas

que almacenan su propia energía para disponer de un medio de propulsión. En este sentido se trata de un procedimiento para recuperar energía, por eso se le suele llamar fricción activa. El MBA resulta de la combinación de esos tres efectos.

Los modelos conocidos en la literatura han sido desarrollados mediante el diseño de movimientos deterministas, en los cuales se pueden obtener velocidades y energías finales que son constantes; además, se postula una clase de ruido en el cual se relaciona al coeficiente de difusión con el teorema de fluctuación disipación (TFD) y la ley de equipartición de la energía [6]. Sin embargo, ésta no debería ser considerada una práctica apropiada porque involucra demasiada libertad cuando se trata del término de flujo (movimiento dominante de la partícula) y restricciones excesivas cuando se trata del ruido. La teoría de los procesos estocásticos sugiere exactamente lo contrario. Por ejemplo, cuando uno estudia la ecuación maestra para los procesos markovianos y lleva a cabo el desarrollo de Kramers-Moyal, resulta, en una dimensión, una expresión como la que sigue:

$$\partial_t P(y, t) = \sum_{n=1}^{\infty} [(-1)^n / n!] (\partial/\partial y)^n \{a_n(y) P\},$$

donde

$$a_n(y) = \int_{-\infty}^{\infty} r^n W(y, r) dr, yW(y, r)$$

es la probabilidad de transición de que ocurra un salto de tamaño r cuando el sistema está en el estado y . La ecuación de Fokker-Planck se obtiene, como aproximación, si hacemos $a_n(y) = 0$ para $n \geq 3$. Así, $a_1(y)$ y $a_2(y)$ están relacionadas en algún sentido estadístico. Esto es obvio cuando uno encuentra que, en equilibrio, se cumple el TFD, lo cual de ninguna manera respalda que ésa debe ser la relación que se cumple para todo tiempo t previo a la etapa en que se alcanza ese régimen. Además, como ha escrito van Kampen en su texto: el enfoque de Langevin ha sido altamente exitoso siempre que las ecuaciones deterministas son lineales, pero en los casos no lineales ha conducido a dificultades [7]. Por otra parte, la experiencia nos muestra con frecuencia que el ruido toma propiedades diferentes cuando el término de flujo cambia, y, además, existen en la literatura ejemplos que indican cómo el ruido puede ser influenciado por el movimiento macroscópico. En consecuencia, hay una gama muy amplia de razones que obligan a revisar los procedimientos citados arriba para construir modelos de MBA. Una forma de resolver este problema teórico es utilizando los procesos de un paso como recurso [10], en cuyo caso se puede partir de una ecuación maestra para utilizar el desarrollo omega de van Kampen y obtener las ecuaciones deterministas no lineales más el ruido gaussiano, que resulta descrito por medio de procesos de Ornstein-Uhlenbeck dependientes del tiempo (POUDT). Éste es el primer objetivo de este artículo. También veremos que el punto de partida para conectar a la teoría con modelos específicos para describir fenómenos naturales son las tasas de transición de un estado físico a otro, mismas que se pueden postular sobre la base de argumentos de plausibilidad, o bien, a partir de mediciones empíricas que arrojen luz sobre la forma de éstas. Encontraremos que el ruido es determinado por las expresiones del formalismo matemático, de donde resultan fenómenos microscópicos muy complejos. Usaremos el MBP en una dimensión como ejemplo sencillo que indica cómo se trabaja con el formalismo y veremos que se alcanza el bien conocido estado de equilibrio.

La segunda meta de este artículo es aplicar las velocidades estocásticas y el concepto de entropía extendida a la comprensión del MBA. El formalismo será ilustrado en general y enseguida mediante su aplicación a un modelo específico construido sobre argumentos de plausibilidad. Encontraremos que las velocidades estocásticas son una herramienta interesante que puede ayudar a la comprensión de la dinámica browniana. Se trata de un formalismo conocido con el nombre de mecánica estocástica, fue desarrollado para obtener la mecánica cuántica a partir de un proceso estocástico en el espacio de configuración [8,9], pero sus potencialidades no han sido explotadas posteriormente fuera de este ámbito y, hasta donde mi conocimiento alcanza, un primer avance en esa dirección puede ser consultado en la Ref. 11. El propósito al usar la cinemática estocástica es describir cualquier fenómeno aleatorio cuyo ruido es lo suficientemente pequeño como para ser descrito con POUDT, incluso si el término de flujo no obedece a una conducta newtoniana. Un ejemplo de sistema físico no newtoniano puede ser consultado en la Ref. 17.

Así, en lugar de enfocarnos a la dinámica estocástica, que necesita de una conexión con la segunda ley de Newton, aquí la idea es recurrir únicamente a la cinemática estocástica, pero sin una definición de aceleración, que sería necesaria para introducir una ecuación de Newton generalizada. En cambio, adoptamos la dinámica que resulte de las tasas de transición, que puede ser newtoniana o no, pero que está a nuestra disposición mediante el desarrollo omega de van Kampen en las ecuaciones deterministas que resultan y en los coeficientes de los POUDT. Como respaldo a la utilidad de las velocidades estocásticas, el uso del concepto de entropía extendida nos permite definir un indicador de tendencia o alejamiento de un estado estacionario, lo cual nos ayuda también a hacer una diferencia entre estacionariedad y estado de equilibrio.

La estructura de este trabajo es la que sigue: en la Sec. 2 se describe el sistema físico a tratar, se desarrolla un tratamiento de MBA mediante procesos de un paso, el estado del sistema físico es un punto que sigue una conducta aleatoria en un espacio bidimensional discreto y se usa el desarrollo omega de van Kampen para los fines mencionados previamente. En la Sec. 3 se discute el MBP para mostrar, con un primer ejemplo, cómo se trabaja con el formalismo. En la Sec. 4 se desarrolla un esquema general para construir diversos modelos de MBA. En la Sec. 5 se introduce el concepto de entropía extendida y se obtienen las condiciones de estacionariedad para POUDT, también se discuten los estados estacionarios para el esquema general de MBA presentado en la Sec. anterior, se presentan las velocidades estocásticas y se escriben en forma cerrada en términos de los momentos estadísticos de la ecuación de Fokker-Planck correspondiente. En la Sec. 6 se construye un modelo específico para ilustrar el uso completo del formalismo, allí

- a) se obtienen y resuelven numéricamente las ecuaciones deterministas;
- b) se estudia el ruido que está presente en torno a las trayectorias deterministas mediante la obtención de los coeficientes de la ecuación de Fokker-Planck del POUDT, se escriben y se resuelven, también por métodos numéricos, las ecuaciones para las autocorrelaciones;
- c) se calcula el indicador de estacionariedad para cada tiempo discreto t en el cual se conocen las soluciones a las ecuaciones anteriores; y
- d) se analiza el estado estacionario mediante las velocidades estocásticas. En la Sec. 7 se realiza una discusión breve que sintetiza los resultados del trabajo.

2. Descripción del Sistema

2.1. Variables dinámicas y ecuación maestra

Nuestro sistema físico es una partícula de masa M , posición x , velocidad v , bajo la acción de un potencial externo $U(x)$ inmerso en un fluido que está a temperatura T .

Además, esta partícula tiene un sistema que absorbe energía del medio para traducirla, mediante algún mecanismo interno, en energía cinética propia. El estado físico del sistema en un instante t es descrito mediante dos variables dinámicas, la velocidad V de la partícula y la variable \mathcal{E} , proporcional a su energía E . La constante de proporcionalidad se escoge como sigue: suponemos que esta partícula browniana es útil para modelar alguna clase de sistema, biológico o fisicoquímico por ejemplo. El sistema biológico podría ser una bacteria cuya vida está relacionada a parámetros externos como la temperatura del fluido, de tal forma que la bacteria puede vivir mientras no se alcance algún máximo de temperatura del fluido. Si se trata de algún sistema fisicoquímico, éste existirá en alguna fase específica. Así existirá una temperatura máxima, $(T_{\text{máx}})$, más allá de la cual deja de existir el diseño experimental que está siendo modelado. En el mismo sentido, habrá una temperatura mínima, $(T_{\text{mín}})$, que marca la cota inferior del intervalo de temperaturas T accesibles al medio de la partícula browniana. Entonces existe también un momento lineal máximo, $(p_{\text{máx}} = \sqrt{Mk_B T_{\text{máx}}})$, útil para definir $\mathcal{E} = (Mk_B T_{\text{máx}})^{-1/2} E$. Como consecuencia, la pareja ordenada (V, \mathcal{E}) tiene las mismas unidades físicas en ambas componentes.

Para llevar a cabo nuestra formulación mediante la ecuación maestra discretizamos este espacio extendido, de tal modo que tendremos la malla $(i\beta, j\epsilon)$, con i un número entero y j un entero no negativo. β es el tamaño de los incrementos en la velocidad y ϵ es la magnitud de los cambios en la variable de energía \mathcal{E} . En esta descripción el estado físico del sistema, al tiempo t , será el punto (i, j) con densidad de probabilidad conjunta $P(i, j, t)$.

Cuando la partícula browniana está en (i, j) al tiempo t puede “comer” energía del medio circundante con una tasa de transición por unidad de tiempo $g(i, j, \vartheta, t)$, siendo ϑ otro conjunto de variables asociadas a la partícula. En el mismo sentido, puede usar esa energía con tasa de transición por unidad de tiempo dada por $r(i, j, \vartheta, t)$. Además, puede ganar velocidad con tasa de transición por unidad de tiempo $G(i, j, \vartheta, t)$, y perderla con tasa de transición por unidad de tiempo $R(i, j, \vartheta, t)$. A partir de este punto, toda la formulación sigue métodos estándar.

Dada una función $f(i, j, \vartheta, t)$, definimos los operadores de paso E_i y E_j como sigue:

$$E_i^{\pm} f(i, j, \vartheta, t) = f(i \pm 1, j, \vartheta, t),$$

$$E_j^{\pm} f(i, j, \vartheta, t) = f(i, j \pm 1, \vartheta, t),$$

de modo que la ecuación maestra para $P(i, j, t)$ se escribe como

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(i, j, t)}{\partial t} &= (E_i^+ - 1) [R(i, j, \vartheta, t) P(i, j, t)] \\ &+ (E_i^- - 1) [G(i, j, \vartheta, t) P(i, j, t)] \\ &+ (E_j^+ - 1) [r(i, j, \vartheta, t) P(i, j, t)] \\ &+ (E_j^- - 1) [g(i, j, \vartheta, t) P(i, j, t)] \end{aligned} \quad (1)$$

2.2. Leyes macroscópicas y fluctuaciones aleatorias

En lo sucesivo, al punto (V, \mathcal{E}) que describe el estado físico del sistema se le llamará “punto estado”. Para obtener una descripción con base en variables intensivas definimos el parámetro de tamaño, $\Omega = M/m$, donde m es la masa de las partículas que forman al fluido circundante. El movimiento determinista del punto estado se obtendrá si tomamos el límite $\Omega \rightarrow \infty$, de modo que definimos $(v, e) = \Omega^{-1} (V, \mathcal{E})$, para descomponer

$$(v, e) = (\psi, \phi) + \frac{1}{\sqrt{\Omega}} (\eta, \xi), \quad (2)$$

donde (ψ, ϕ) es la parte determinista del movimiento del punto estado y (η, ξ) es el ruido alrededor. Un poco de álgebra permite encontrar las leyes macroscópicas para describir la evolución temporal de (ψ, ϕ) y la descripción estocástica para el ruido (para los detalles consultar la Ref. 20).

El operador de paso E_i^+ incrementa en una unidad a la variable extensiva (V) , por lo tanto, la variable intensiva (v) , tiene un incremento dado por $1/(\sqrt{\Omega})$. Algo similar ocurre con \mathcal{E} y e . El resultado se expresa como sigue

$$\begin{aligned} E_i^+ &= v + \frac{1}{\sqrt{\Omega}} = \psi(t) + \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \eta(t) + \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \\ &= \psi(t) + \frac{1}{\sqrt{\Omega}} (\eta(t) + 1), \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} E_j^+ &= e + \frac{1}{\sqrt{\Omega}} = \phi(t) + \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \xi(t) + \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \\ &= \phi(t) + \frac{1}{\sqrt{\Omega}} (\xi(t) + 1). \end{aligned} \quad (4)$$

Introduciendo la notación corta escribimos

$$\begin{aligned} R(i, j, \vartheta, t) &\rightarrow R_\eta, & G(i, j, \vartheta, t) &\rightarrow G_\eta, \\ r(i, j, \vartheta, t) &\rightarrow r_\xi, & g(i, j, \vartheta, t) &\rightarrow g_\xi \end{aligned}$$

y

$$R_\eta = \Omega^{\frac{1}{2}} R_\eta^{(0)} + \Omega R_\eta^{(1)}, \quad G_\eta = \Omega^{\frac{1}{2}} G_\eta^{(0)} + \Omega G_\eta^{(1)}, \quad (5)$$

$$r_\xi = \Omega^{\frac{1}{2}} r_\xi^{(0)} + \Omega r_\xi^{(1)}, \quad g_\xi = \Omega^{\frac{1}{2}} g_\xi^{(0)} + \Omega g_\xi^{(1)}. \quad (6)$$

Siguiendo paso a paso el desarrollo omega de van Kampen se obtienen las ecuaciones para la parte macroscópica

$$\frac{d}{dt} \langle \psi \rangle (t) = \langle G_\eta^{(1)} - R_\eta^{(1)} \rangle, \quad \frac{d}{dt} \langle \phi \rangle (t) = \langle g_\xi^{(1)} - r_\xi^{(1)} \rangle. \quad (7)$$

El punto estado de la partícula browniana tiene un movimiento macroscópico dado por la curva que describe la pareja ordenada $(\langle \psi \rangle (t), \langle \phi \rangle (t))$ y el sistema de Ecs. (7) nos proporciona las leyes deterministas. Además habrá un ruido estocástico dado por las variables aleatorias (η, ξ) , con propiedades estadísticas dadas por la densidad de probabilidad conjunta, $\Pi(\eta, \xi, t)$, que satisface la ecuación de Fokker-Planck

que sigue:

$$\frac{\partial}{\partial t} \Pi(\eta, \xi, t) = -\frac{\partial}{\partial \eta} (A_\eta \Pi) - \frac{\partial}{\partial \xi} (A_\xi \Pi) + \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} (D_\eta \Pi) + \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} (D_\xi \Pi), \quad (8)$$

donde

$$A_\eta = G_\eta^{(0)} - R_\eta^{(0)}, \quad A_\xi = g_\xi^{(0)} - r_\xi^{(0)}, \\ D_\eta = R_\eta^{(1)} + G_\eta^{(1)}, \quad D_\xi = r_\xi^{(1)} + g_\xi^{(1)}. \quad (9)$$

Esto es suficiente para construir modelos de MBA. El resto del trabajo consiste en postular tasas de transición basándose en argumentos teóricos, o bien, en mediciones empíricas.

La solución a la ecuación de Fokker-Planck anterior es

$$\tilde{P}(\mathbf{y}, \mathbf{t}) = \frac{\exp\left(-\frac{1}{2} [\mathbf{y} - \langle \mathbf{y} \rangle]^T \Xi^{-1}(\mathbf{t}) [\mathbf{y} - \langle \mathbf{y} \rangle]\right)}{(2\pi)^{\frac{p}{2}} \sqrt{\det \Xi(\mathbf{t})}}, \quad (10)$$

donde

$$\langle \mathbf{y} \rangle(t) = \int \tilde{P}(\mathbf{y}, t) \mathbf{y} d^p y, \\ \Xi_{\mu\nu}(t) = \int \tilde{P}(\mathbf{y}, t) (y_\mu y_\nu - \langle y_\mu \rangle \langle y_\nu \rangle) d^p y \quad (11)$$

son el primero y segundo momento estadístico. Compactando la notación $(A_\eta, A_\xi) = \mathbf{L}(t) \mathbf{y}$, $\Xi(t) = \{\Xi_{\mu\nu}(t)\}$, y $\mathbf{D}(t) = \{D_{\mu\nu}(t)\}$, la evolución temporal se describe mediante los siguientes sistemas de ecuaciones no autónomas:

$$\frac{d\langle \mathbf{y} \rangle(t)}{dt} = \mathbf{L}(t) \langle \mathbf{y} \rangle(t). \quad (12)$$

A $\mathbf{L}(t)$ se le llama matriz de convección. Para las funciones de autocorrelación centradas el sistema de ecuaciones diferenciales no autónomas es

$$\frac{d\Xi(t)}{dt} - \mathbf{L}(t) \Xi(t) - \Xi(t) \mathbf{L}^\dagger(t) = 2\mathbf{D}(t) \quad (13)$$

y

$$\frac{d}{dt} \{\log [\det \Xi(t)]\} = 2Tr [\mathbf{D}(t) \Xi^{-1}(t) + \mathbf{L}(t)]. \quad (14)$$

3. Aplicación al movimiento browniano pasivo

Supongamos un movimiento browniano cuyas tasas de transición para las energías son:

$$g_\xi = Q(x, t), \quad r_\xi = c\mathcal{E}(t), \quad (15)$$

y para las velocidades son

$$G_\eta = 0, \quad R_\eta = \gamma_0 V + \frac{\partial U}{\partial x}. \quad (16)$$

Usando (2) tenemos

$$g_\xi^{(1)} = q(x, t), \quad r_\xi^{(1)} = c\phi(t), \quad g_\xi^{(0)} = 0, \\ r_\xi^{(0)} = c\xi, \quad G_\eta^{(1)} = 0, \quad R_\eta^{(1)} = \gamma'_0 \psi(t) + \frac{\partial U'}{\partial x}, \\ G_\eta^{(0)} = 0, \quad R_\eta^{(0)} = \gamma'_0 \eta. \quad (17)$$

Las ecuaciones macroscópicas que nos dicen cómo gana y pierde energía y velocidad este modelo de movimiento browniano son

$$\frac{d\phi(t)}{dt} + c\phi(t) = q(x, t), \quad \frac{d\psi(t)}{dt} + \gamma'_0 \psi(t) = -\frac{\partial U'}{\partial x}.$$

Para la conducta microscópica necesitamos calcular los coeficientes de la ecuación de Fokker-Planck (8), el término de flujo es

$$\begin{pmatrix} A_\xi \\ A_\eta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\gamma'_0 & \\ & -c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix},$$

la matriz de convección es

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} -\gamma'_0 & 0 \\ 0 & -c \end{pmatrix}.$$

El término de difusión está dado mediante la matriz correspondiente

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \gamma'_0 \psi(t) + \frac{\partial U'}{\partial x} & 0 \\ 0 & c\phi(t) + q(x, t) \end{pmatrix}.$$

Para establecer contacto con el material común en los libros de texto tomaremos el caso particular en que:

- El potencial externo es lineal: $U' = F$, con F la fuerza constante.
- La absorción de energía a partir del medio circundante es uniforme en todo el fluido: $q(x, t) = q$.

Resultan las siguientes ecuaciones para la parte determinista de la velocidad y la energía:

$$\frac{d\psi(t)}{dt} + \gamma'_0 \psi(t) = F, \quad \frac{d\phi(t)}{dt} + c\phi(t) = q,$$

con conducta asintótica

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \psi(t) = \frac{F}{\gamma'_0}, \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \phi(t) = \frac{c}{\gamma'_0}.$$

Para $F = 0$ las matrices de convección y de difusión toman la forma que sigue:

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} -\gamma'_0 & 0 \\ 0 & -c \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D}(t) = \begin{pmatrix} \gamma'_0 \psi(t) & 0 \\ 0 & c\phi(t) + q \end{pmatrix}.$$

Para tiempos largos las fluctuaciones estocásticas del punto que representa el estado físico de la partícula libre con absorción uniforme tiene la siguiente matriz de autocorrelación:

$$\Xi = \begin{pmatrix} \Xi_{11} & \Xi_{12} \\ \Xi_{12} & \Xi_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi(\infty) & 0 \\ 0 & \phi(\infty) + \frac{q}{c} \end{pmatrix}.$$

La relación entre $\psi(\infty)$ y la velocidad $V(\infty)$ es $\langle V^2(\infty) \rangle = \Omega^2 \langle v^2(\infty) \rangle$, de donde resulta que

$$\langle V^2(\infty) \rangle - \Omega^2 \psi^2(\infty) = \Omega \langle \eta^2(\infty) \rangle = \Omega \Xi_{11} = \Omega \psi(\infty).$$

Además, haciendo $(d\Xi(\infty))/dt = 0$ en la Ec. (13) resulta

$$\frac{1}{2} (\mathbf{L}(\infty) \Xi(\infty) + \Xi(\infty) \mathbf{L}^\dagger(\infty)) = \mathbf{D}(\infty),$$

de donde se obtiene, para este caso, lo siguiente:

$$D_{11} = \gamma'_0 \Xi_{11} = \gamma'_0 \psi(\infty).$$

Aplicando la ley de equipartición de la energía $\langle [\Delta V(\infty)]^2 \rangle = (k_B T)/M$, resulta

$$D_{11} = \frac{\gamma'_0 k_B T}{\Omega M}.$$

Si \mathcal{D} es el coeficiente de difusión usual del movimiento browniano, encontramos que $\Omega D_{11} = \mathcal{D}$.

En este caso particular está clara la relación de \mathcal{D} con la temperatura, pero no existe base física para suponer que durante el proceso de relajación previo se cumple que \mathcal{D} tiene que ser una función lineal de la temperatura T del fluido. Por esta razón, los procedimientos que hemos mencionado en la introducción para construir modelos de MBA no tienen sustento teórico consistente.

4. Un esquema general para construir modelos de MBA

Sea Y una variable dinámica extensiva del sistema físico bajo consideración y $y = \Omega^{-1} Y$ su variable dinámica intensiva, sea $f_{ext}(Y)$ una función analítica tal que

$$f_{ext}(Y) = f_{ext}(\Omega y) = \Omega f_{int}(y), \tag{18}$$

donde $f_{ext}(Y)$ y $f_{int}(y)$ son funciones acotadas y tienen las mismas condiciones de frontera en 0 y en ∞ .

La hipótesis básica es que la partícula browniana activa absorbe energía del medio con tasa

$$g(V) = ad\rho(V) \mathcal{E}(t),$$

donde a toma valores 1 ó 0 para conectar o desconectar el término activo, d es la fracción de conversión de energía interna a cinética, $\rho(V)$ es una función que modula esta capacidad de conversión en términos de la velocidad V de la partícula y debe cumplir con la condición (18).

Las tasas de transición (15) y (16) se modifican como sigue:

$$g_\xi = Q(x, t), \quad r_\xi = c\mathcal{E}(t) + ad\rho(V) \mathcal{E}(t), \tag{19}$$

y

$$G_\eta = ad\rho(V) \mathcal{E}(t), \quad R_\eta = \gamma_0 V + \frac{\partial U}{\partial x}. \tag{20}$$

Desarrollando en serie de Taylor $\rho(\Omega v) = \rho(\Omega[\psi + \varepsilon\eta])$, con $\varepsilon = \Omega^{-\frac{1}{2}}$, conservamos términos a primer orden en ε y obtenemos las siguientes modificaciones a las tasas de transición (17):

$$g_\xi^{(1)} = q(x, t), \quad r_\xi^{(1)} = c\phi(t) + ad\phi(t) \rho[\psi(t)], \tag{21}$$

$$g_\xi^{(0)} = 0, \quad r_\xi^{(0)} = ad\phi(t) \left[\frac{\partial \rho}{\partial v} \right]_{v=\psi} \eta + (c + ad\rho[\psi(t)]) \xi, \tag{22}$$

$$G_\eta^{(1)} = ad\phi(t) \rho[\psi(t)], \quad R_\eta^{(1)} = \gamma'_0 \psi(t) + \frac{\partial U'}{\partial x},$$

$$G_\eta^{(0)} = a \left[d\phi(t) \left[\frac{\partial \rho}{\partial v} \right]_{v=\psi} \eta + d\rho[\psi(t)] \xi \right],$$

$$R_\eta^{(0)} = \gamma'_0 \eta. \tag{23}$$

Las ecuaciones deterministas (7) que describen la evolución del estado físico del sistema son

$$\begin{aligned} \frac{d\psi(t)}{dt} + \gamma'_0 \psi(t) &= ad\phi(t) \rho[\psi(t)] - \frac{\partial U'}{\partial x}, \\ \frac{d\phi(t)}{dt} + c\phi(t) &= q(x, t) - ad\phi(t) \rho[\psi(t)]. \end{aligned} \tag{24}$$

Los coeficientes de la ecuación de Fokker-Planck (8) son

$$\begin{pmatrix} A_\eta \\ A_\xi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_\eta^{(0)} - R_\eta^{(0)} \\ g_\xi^{(0)} - r_\xi^{(0)} \end{pmatrix} = \mathbf{L} \mathbf{y},$$

con $\mathbf{y} = (\xi, \eta)$ y

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} -\gamma'_0 + ad\phi(t) \left[\frac{\partial \rho}{\partial v} \right]_{v=\psi} & ad\rho[\psi(t)] \\ -ad\phi(t) \left[\frac{\partial \rho}{\partial v} \right]_{v=\psi} & -c - ad\rho[\psi(t)] \end{pmatrix}, \tag{25}$$

el término de difusión es

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} G_\eta^{(1)} + R_\eta^{(1)} & 0 \\ 0 & g_\xi^{(1)} + r_\xi^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ad\phi(t) \rho[\psi(t)] + \gamma'_0 \psi(t) + \frac{\partial U'}{\partial x} & 0 \\ 0 & q(x, t) + c\phi(t) + ad\phi(t) \rho[\psi(t)] \end{pmatrix}. \tag{26}$$

El caso pasivo se recupera haciendo $a = 0$.

5. Velocidades estocásticas

En esta sección hacemos una presentación breve de las velocidades estocásticas, un desarrollo detallado puede ser consultado en la Ref. 11. Intencionalmente cambiamos la notación a un proceso estocástico $\mathbf{q}(t)$ para mantener nuestra atención sobre el carácter general de los conceptos de esta sección. Partimos de que existe asociada una velocidad $\mathbf{v}(t)$ que permite medir los cambios de posición del punto estado del sistema en el transcurso del tiempo, pero debido a la naturaleza aleatoria de $\mathbf{q}(t)$, el operador de derivada total respecto al tiempo que lo relaciona con la velocidad ya no puede ser utilizado, es decir, la expresión: $\mathbf{v}(t) = (d/dt)\mathbf{q}(t)$, ya no es válida porque en términos del análisis clásico, la curva que describe $\mathbf{q}(t)$ es no derivable, con probabilidad uno, en todos y cada uno de sus puntos. Para resolver este problema se definen velocidades de curvas localmente suavizadas, en el mismo sentido en que se suavizan las curvas en la teoría de las series de tiempo. Para este fin se escribe la velocidad como la suma de una velocidad sistemática (o de corriente, \mathbf{v}_c) más una componente estocástica, $\mathbf{u} : \mathbf{v} = \mathbf{v}_c + \mathbf{u}$ [12]. La conducta de estas velocidades puede ser clasificada mediante la introducción de un operador \hat{T} para producir una inversión temporal, ésta se representa como sigue: $\hat{T}\mathbf{G}(\mathbf{q}, t) = \mathbf{G}(\mathbf{q}, -t)$, donde $\mathbf{G}(\mathbf{q}, t)$ es una variable dinámica del sistema físico. Las velocidades invertidas en el tiempo son $\tilde{\mathbf{v}}_c = \hat{T}\mathbf{v}_c$ y $\tilde{\mathbf{u}} = \hat{T}\mathbf{u}$. Existen argumentos físicos [12] para esperar que se cumplan las siguientes reglas de transformación bajo inversiones temporales: $\tilde{\mathbf{v}}_c = -\mathbf{v}_c$ y $\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u}$. Así, debe cumplirse $\tilde{\mathbf{v}} = -\mathbf{v}_c + \mathbf{u}$. Por lo tanto, $\mathbf{v}_c = (1/2)(\mathbf{v} - \tilde{\mathbf{v}})$ y $\mathbf{u} = (1/2)(\mathbf{v} + \tilde{\mathbf{v}})$.

Los nuevos operadores que han sido obtenidos en mecánica estocástica para relacionar $\mathbf{q}(t)$ con $\mathbf{v}(t)$, son [12]

$$\begin{aligned} \hat{D} &= \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_q + \nabla_q \cdot \mathbf{D}\nabla_q, \\ \tilde{D} &= -\frac{\partial}{\partial t} + \tilde{\mathbf{v}} \cdot \nabla_q + \nabla_q \cdot \mathbf{D}\nabla_q \end{aligned} \quad (27)$$

con $v_\mu, D_{\mu\nu}$ los límites de los primeros y segundos promedios de grano grueso cuando $\Delta t \rightarrow 0$. La densidad de probabilidad conjunta es $\mathcal{P}(\mathbf{q} - \mathbf{q}', t)$. El propósito de este promedio es suavizar las trayectorias estocásticas en una vecindad local (célula), \mathcal{B} , del punto \mathbf{q} :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}\{F(\mathbf{q}, t)\} &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left\langle \frac{\Delta F(\mathbf{q}, t)}{\Delta t} \right\rangle_{\mathcal{B}} \\ &= \int_{\mathcal{B}} dq'_1 \dots dq'_p \mathcal{P}(\mathbf{q} - \mathbf{q}', t) \left(\frac{\Delta F(\mathbf{q}, t)}{\Delta t} \right), \end{aligned} \quad (28)$$

con $\mathcal{P}(\mathbf{q} - \mathbf{q}', t)$ normalizado dentro de la célula \mathcal{B} y

$$F(\mathbf{q}, t) = \Delta q_\mu(t), \quad \text{o} \quad 2\Delta q_\mu(t) \Delta q_\nu(t).$$

Este promedio nos proporciona cantidades localmente promediadas en el mismo sentido que se usan los promedios móviles de las series de tiempo. El límite $\Delta t \rightarrow 0$ no puede

ser tomado arbitrariamente en el sentido matemático usual, en su lugar, es necesario tomar en cuenta dos intervalos de tiempo, que son: el tiempo más pequeño T_0 necesario para observar un movimiento sistemático, y además, el tiempo de autocorrelación t_c del proceso estocástico $\mathbf{q}(t)$. El intervalo Δt debe ser tal que $T_0 \gg \Delta t \gg t_c$. Las relaciones entre $\mathbf{q}(t)$ y las velocidades de corriente son

$$\mathbf{v}(t) = \hat{D}\mathbf{q}(t), \quad \tilde{\mathbf{v}}(t) = \tilde{D}\mathbf{q}(t), \quad (29)$$

que pueden ser consideradas como la generalización de la derivada temporal utilizada en cinemática. Un enfoque matemáticamente riguroso se encuentra en la Ref. 13.

Definiendo los operadores

$$\hat{D}_c = \hat{D}^{(-)} = \frac{1}{2}(\hat{D} - \tilde{D}), \quad \hat{D}_s = \hat{D}^{(+)} = \frac{1}{2}(\hat{D} + \tilde{D}), \quad (30)$$

se obtienen otras relaciones entre las velocidades de corriente y estocástica con el proceso $\mathbf{q}(t)$:

$$\mathbf{v}_c = \hat{D}_c\mathbf{q}(t), \quad \mathbf{u} = \hat{D}_s\mathbf{q}(t). \quad (31)$$

Es fácil encontrar que $\hat{D}_c = \hat{D}$ y que

$$\hat{D}_s = \mathbf{u} \cdot \nabla_q + \nabla_q \cdot \mathbf{D}\nabla_q.$$

Otra combinación útil es el operador de salida

$$\hat{D}_e = \hat{D}_c + \hat{D}_s,$$

idéntico en forma a \hat{D} . Así, \mathbf{v} se puede denotar como \mathbf{v}_e y cambiarle el nombre a "velocidad de salida". Además es posible definir el operador de acceso $\hat{D}_a = \hat{D}_c - \hat{D}_s = -\tilde{D}$, para obtener la velocidad de acceso $\mathbf{v}_a = \mathbf{v}_c - \mathbf{u}$. Las relaciones de esas velocidades con el proceso $\mathbf{q}(t)$ son

$$\mathbf{v}_e = \hat{D}_e\mathbf{q}(t), \quad \mathbf{v}_a = \hat{D}_a\mathbf{q}(t). \quad (32)$$

Si tenemos un ensemble de partículas brownianas activas, tendremos una nube de puntos estado en el espacio de fluctuaciones $\{\mathbf{q}\}$, entonces \mathbf{v}_a es la velocidad promedio local de los puntos estado que alcanzan la vecindad (célula) del punto \mathbf{q} , mientras que \mathbf{v}_e es la velocidad promedio local de los estados punto que salen del punto \mathbf{q} .

Una vez que se ha alcanzado este nivel de desarrollo del formalismo, el paso usual ha sido obtener una dinámica para los puntos estado. En mecánica estocástica se logra definiendo una expresión para la aceleración estocástica, lo cual permite establecer una relación, en sentido newtoniano, con una fuerza estocástica. Ésta es una hipótesis extra que aquí no necesitamos, por el contrario, siguiendo el enfoque presentado en la Ref. 14, es posible relacionar los coeficientes A_μ y $D_{\mu\nu}$ de la ecuación de Fokker-Planck hacia adelante, con las velocidades estocásticas (ver la Ref. 11 para los detalles). Se obtiene

$$v_\mu^e(\mathbf{q}, t) = A_\mu(\mathbf{q}, t),$$

$$u_\mu = \sum_{\nu=1}^p \frac{1}{\mathcal{P}(\mathbf{q}, t)} \frac{\partial(D_{\mu\nu}\mathcal{P}(\mathbf{q}, t))}{\partial q_\nu}. \quad (33)$$

Con $v_\mu^c = v_\mu^e - u_\mu$ y $v_\mu^a = v_\mu^e - 2u_\mu$ es posible determinar las velocidades de acceso y de corriente. La velocidad de difusión está escrita en términos de la densidad de probabilidad conjunta, $\mathcal{P}(\mathbf{q}, t)$, que satisface la ecuación de Fokker-Planck, de donde resulta que es necesario resolver ésta primero antes de conocer u_μ . En general, éste es el punto débil de este enfoque, sin embargo, para el problema bajo consideración, sólo tenemos procesos gaussianos, en cuyo caso es fácil, y útil, encontrar las velocidades estocásticas para los POUDT. Resulta

$$\mathbf{u} = -\mathbf{D}\boldsymbol{\Xi}^{-1}(\mathbf{q} - \langle \mathbf{q} \rangle), \quad \mathbf{v}_e = \mathbf{L}\mathbf{q}, \quad (34)$$

$$\mathbf{v}_c = \mathbf{L}\mathbf{q} + \mathbf{D}\boldsymbol{\Xi}^{-1}(\mathbf{q} - \langle \mathbf{q} \rangle),$$

$$\mathbf{v}_a = \mathbf{L}\mathbf{q} + 2\mathbf{D}\boldsymbol{\Xi}^{-1}(\mathbf{q} - \langle \mathbf{q} \rangle). \quad (35)$$

5.1. Entropía extendida y condiciones de estado estacionario para POUDT

En este trabajo se utilizan las siguientes definiciones: primero, hablamos de procesos estacionarios cuando en un proceso estocástico $Y(t)$, los momentos estadísticos no son afectados por un corrimiento en el tiempo [7]:

$$\langle Y(t_1 + \tau) Y(t_2 + \tau) \dots Y(t_n + \tau) \rangle = \langle Y(t_1) Y(t_2) \dots Y(t_n) \rangle. \quad (36)$$

Segundo, decimos que un proceso estocástico cumple con el balance detallado si, en el estado estacionario, cada una de las transiciones posibles está balanceada con la transición que ocurre en sentido contrario [15]. Y tercero, afirmamos que un proceso estocástico alcanza el estado de equilibrio cuando se cumple la Ec. (36), y además se mantiene el balance detallado.

La separación de la evolución temporal del estado físico del sistema en una parte determinista más una parte estocástica que está descrita mediante los POUDT nos permite reducir el análisis de la Ec. (36) a los primeros y segundos momentos estadísticos de las fluctuaciones aleatorias. La parte determinista del problema se analiza con base en las herramientas aplicables a los sistemas de ecuaciones diferenciales no lineales acopladas, así, dado un sistema no lineal, es posible utilizar las técnicas estándar para determinar la existencia de un punto fijo [16]. En esencia, se requiere que el sistema de ecuaciones algebraicas siguiente

$$\dot{z}_\mu^*(\infty) = A_\mu[\mathbf{z}^*(\infty), \infty] = 0, \quad \mu = 1, \dots, p, \quad (37)$$

tenga solución y cumpla con las condiciones de estabilidad adecuadas.

El segundo conjunto de condiciones se obtienen a partir de las Ecs.(12) y (13) en $t = \infty$:

$$\mathbf{L}(\infty) \langle \mathbf{y} \rangle(\infty) = 0, \quad (38)$$

$$\mathbf{L}(\infty) \boldsymbol{\Xi}(\infty) + \boldsymbol{\Xi}(\infty) \mathbf{L}^\dagger(\infty) = -2\mathbf{D}(\infty). \quad (39)$$

Estas ecuaciones algebraicas deben tener solución no trivial $\boldsymbol{\Xi}(\infty)$ en términos de los elementos de la matriz de convección $\mathbf{L}(\infty)$ y de los coeficientes de difusión $\mathbf{D}(\infty)$. Entonces se puede obtener un TFD para un estado estacionario que se mantendrá para $t > \tau > 0$, donde τ es el tiempo de relajación.

Una condición general para la condición estacionaria de las fluctuaciones se obtiene mediante la introducción de la entropía extendida del proceso:

$$S(t) = -k_B \langle \log \tilde{P}(\mathbf{y}, t) \rangle, \quad (40)$$

de modo que sustituyendo (10) en (40), resulta

$$S(t) = \frac{k_B}{2} \log [\det \boldsymbol{\Xi}(t)] + \log (2\pi e)^{\frac{p}{2}}. \quad (41)$$

El cambio de entropía del tiempo t_1 al tiempo t_2 es

$$\Delta S = S(t_2) - S(t_1) = k_B \log \left[\frac{\det \boldsymbol{\Xi}(t_2)}{\det \boldsymbol{\Xi}(t_1)} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (42)$$

y para que se cumpla la condición $\Delta S \geq 0$, debe cumplirse

$$\det \boldsymbol{\Xi}(t_2) \geq \det \boldsymbol{\Xi}(t_1). \quad (43)$$

A partir de las Ecs. (42) y de (14) resulta la siguiente condición de estado estacionario:

$$Tr(\mathbf{D}\boldsymbol{\Xi}^{-1}) = -Tr(\mathbf{L}). \quad (44)$$

Para estudiar más adelante la tendencia al estado estacionario, definimos la función indicadora

$$G(t) = Tr(\mathbf{D}\boldsymbol{\Xi}^{-1}) + Tr(\mathbf{L}), \quad (45)$$

que deberá hacerse cero cuando se alcance la estacionariedad.

Una condición más fuerte es la condición de equilibrio, que además de la Ec. (45), incluye el balance detallado mediante la exigencia de que la densidad de corriente de probabilidad no rote. Para este fin escribimos la ecuación de Fokker-Planck como sigue:

$$\frac{\partial \tilde{P}(\mathbf{y}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{y}, t) = 0,$$

con $\mathbf{J}(\mathbf{y}, t)$ la densidad de corriente de probabilidad dada por

$$\mathbf{J}(\mathbf{y}, t) = \tilde{P}(\mathbf{y}, t) [\mathbf{D}\boldsymbol{\Xi}^{-1} + \mathbf{L}] \mathbf{y},$$

entonces la condición de que \mathbf{J} presente un flujo irrotacional lleva a la condición siguiente:

$$\mathbf{D}\boldsymbol{\Xi}^{-1} + \mathbf{L} = 0. \quad (46)$$

De la Ec. (12) resulta que el promedio de las fluctuaciones se anula para $t \rightarrow \infty$ cuando la matriz de convección, \mathbf{L} , toma eigenvalores negativos para tiempos muy largos. Así la velocidad de corriente toma la forma $\mathbf{v}_c = (\mathbf{L} + \mathbf{D}\Xi^{-1}) \mathbf{q}$, de modo que, comparando con la condición de equilibrio (46), encontramos que en términos del lenguaje de las velocidades estocásticas $\mathbf{v}_c = 0$ es una manera equivalente de escribir la condición de equilibrio. Por otra parte, la velocidad de difusión es como sigue: $\mathbf{u} = -\mathbf{D}\Xi^{-1}\mathbf{q}$, en tanto que la velocidad de salida es $\mathbf{v}_e = \mathbf{L}\mathbf{q}$, de donde resulta que otra forma equivalente de establecer la condición de equilibrio es plantear la compensación de las velocidades de difusión y de salida: $\mathbf{u} = \mathbf{v}_e$.

5.2. Estados estacionarios en MBA

Supongamos un modelo de MBA acorde al esquema general planteado en la Sec. 4. Sea $\mathbf{z}^*(\infty)$ un punto fijo estable que satisface las Ecs. (37), sean $\mathbf{L}(\infty)$ y $\mathbf{D}(\infty)$, los coeficientes de la ecuación de Fokker-Planck para tiempos suficientemente largos. Las funciones de autocorrelación, que son las componentes de la matriz $\Xi(\infty)$, cumplen con la Ec. (39), que puede ser escrita mediante el sistema algebraico

$$\mathbf{B}\sigma = \mathbf{d},$$

con

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} & 0 \\ L_{21} & L_{11} + L_{22} & L_{12} \\ 0 & L_{21} & L_{22} \end{pmatrix},$$

$$\sigma = \begin{pmatrix} \Xi_{11} \\ \Xi_{12} \\ \Xi_{22} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{d} = \begin{pmatrix} D_{11} \\ 0 \\ D_{22} \end{pmatrix},$$

donde L_{ij} y D_{ij} son las componentes de las matrices de convección y de difusión, respectivamente.

El determinante Δ de la matriz \mathbf{B} es diferente de cero siempre que L_{11} y L_{22} sean diferentes de cero, de modo que la solución σ siempre existe. Un trabajo algebraico largo pero sencillo muestra que la condición de estacionariedad (44) siempre se cumple, en cambio, no ocurre lo mismo con la condición de equilibrio (46).

6. Un modelo de MBA

6.1. Definición del modelo y soluciones numéricas

Sea el modelo de MBA definido por las tasas de transición (21), con función de capacidad de conversión $\rho[V(t)]$:

$$\rho[V(t)] = AV(t)e^{-BV(t)},$$

con A y B constantes. Esto significa que la capacidad de conversión de energía interna en energía cinética crece con la velocidad de la partícula hasta alcanzar un valor óptimo, después del cual disminuye exponencialmente. Con fuerza

$F = -(\partial U')/(\partial x)$ constante, las ecuaciones deterministas toman la forma que sigue:

$$\frac{d\psi(t)}{dt} + \gamma'_0\psi(t) = adA\phi(t)\psi(t)e^{-B\psi(t)} + F,$$

$$\frac{d\phi(t)}{dt} + c\phi(t) = q(x,t) - adA\phi(t)\psi(t)e^{-B\psi(t)}. \quad (47)$$

Éstas fueron resueltas numéricamente mediante el método Runge-Kutta de cuarto orden para absorción de energía uniforme en todo el fluido: $q(x,t) = q$. Los parámetros utilizados para desarrollar el ejemplo son: $B = 1$, $A = 0,5$, $a = 1$, $d = 1/2$, $\gamma'_0 = 1$, $q = 1$, $c = 0,3$ y $F = 4$. Con condiciones iniciales

$$(\psi(0), \phi(0)) = \{(1, 1), (8, 1), (8, 8), (1, 8)\},$$

la Fig. 1 indica la evolución de las soluciones en el espacio de estados del sistema de donde encontramos que, aunque modificamos las condiciones iniciales, el estado final siempre es el mismo. Un estudio analítico permite demostrar que se trata de un punto estado cuyo entorno es una cuenca formada por todos los puntos que, utilizados como condiciones iniciales en las Ecs. (47), conducen siempre al mismo estado final. Por eso se le llama estado atractor.

Un estudio numérico permite concluir que el estado atractor cambia de posición conforme se modifica la fuerza constante externa. La Fig. 2 muestra este efecto. Conocidas las funciones $(\psi(t), \phi(t))$ que satisfacen las Ecs. (47), es posible calcular las componentes de la matriz de convección, \mathbf{L} , y de la matriz de difusión, \mathbf{D} . En particular, es de recalcar que \mathbf{L} tiene eigenvalores negativos para tiempos muy largos, donde resulta que las fluctuaciones medias tienden a cero.

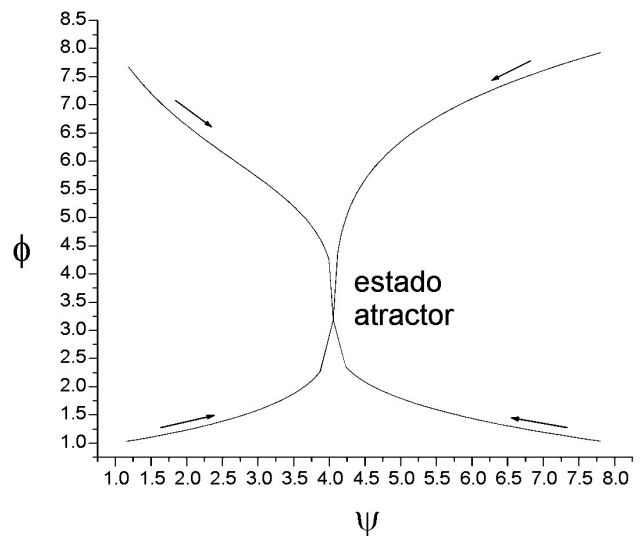


FIGURA 1. Evolución hacia un estado atractor. Se grafican las soluciones numéricas a las Ecs. (47) con parámetros: $B=1$, $A=0,5$, $a = 1$, $d = 1/2$, $\gamma'_0 = 1$, $q = 1$, $c = 0,3$, $F = 4$ y condiciones iniciales: $(\psi(0), \phi(0)) = \{(1, 1), (8, 1), (8, 8), (1, 8)\}$. El estado atractor es $(\psi_{final}, \phi_{final}) = (4.56, 2.36)$.

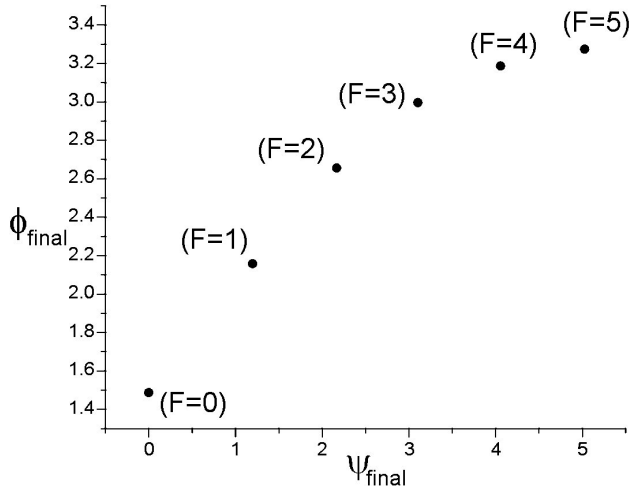


FIGURA 2. La posición del estado atractor se modifica cuando la fuerza externa constante varía. Se obtienen resolviendo numéricamente las Ecs. (47) con los mismos parámetros de la Fig. 1, pero asignando los siguientes valores a la fuerza: $F = 0, 1, 2, 3, 4, 5$.

Un modelo de MBA donde las ecuaciones deterministas tienen punto fijo, y las funciones de autocorrelación tienden a valores constantes para tiempos largos, pero donde uno de los eigenvalores de \mathbf{L} es positivo, puede consultarse en la Ref. 11. En ese caso una de las fluctuaciones medias crece hasta el grado de que la descripción mediante POUdT pierde validez. La solución numérica del sistema de ecuaciones no autónomo (13) se presenta en la Fig. 3, para el conjunto de parámetros utilizados en la Fig. 1. Se trata de las funciones de autocorrelación que evolucionan hacia valores constantes en el tiempo.

Estos resultados ya sugieren que las funciones de autocorrelación evolucionan hacia estados estacionarios pero la forma de establecer la existencia de estacionariedad es mediante el cálculo de la función indicadora $G(t)$ definida

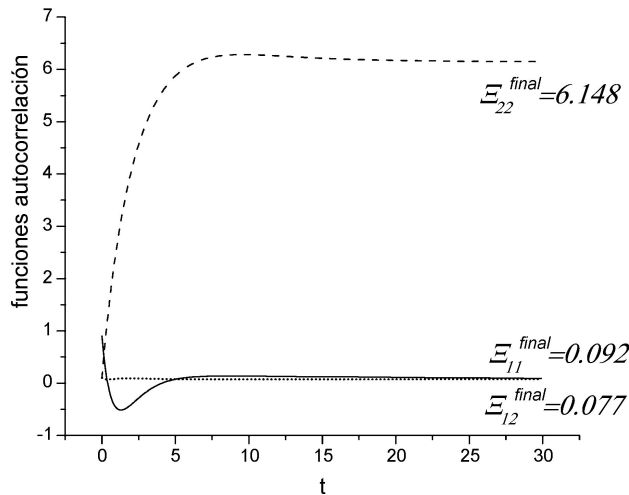


FIGURA 3. Las funciones de autocorrelación $\Xi_{11}, \Xi_{12}, \Xi_{22}$, evolucionan hacia valores constantes en el tiempo. Se grafican las soluciones numéricas a las Ecs. (13), con los mismos parámetros de la Fig. 1.

en (45). La realización de este cálculo numérico es extenso porque es necesario calcular la matriz de autocorrelaciones, Ξ , y su inversa, Ξ^{-1} , en cada instante del tiempo discretizado que ha sido usado para resolver las Ecs. (47), antes de calcular $G(t)$. La gráfica de la Fig. 4 presenta el resultado para el ejemplo que estamos considerando.

6.2. La estacionariedad en términos de las velocidades estocásticas

Un cálculo numérico indica que la velocidad de corriente no es cero, lo cual lleva a la idea ingenua de que los puntos estado del sistema viajan hacia alguna región lejos del punto fijo. Además, las velocidades de difusión y de salida no se compensan. La visión geométrica que es de esperarse en este ejemplo de estacionariedad sin balance detallado consiste en que las fluctuaciones positivas y negativas en las velocidades no se compensan entre sí, como tampoco lo hacen las fluctuaciones positivas y negativas en las energías. Esto se debe a que está ocurriendo una rotación de la corriente de probabilidad, idea geométrica que puede ser muy bien descrita si definimos una velocidad angular ω con base en v_c :

$$\omega = \frac{1}{2} (y_1 v_2^c - y_2 v_1^c). \tag{48}$$

Para el ejemplo numérico que hemos desarrollado en esta sección resulta que ω tiene la siguiente forma bilineal:

$$\omega = \frac{1}{2} (ay_1^2 - by_2^2 + cy_1y_2) \tag{49}$$

con $a = 0.11, b = 0.15$ y $c = 0.07$. La velocidad angular es una superficie con forma de silla de montar que se anula cuando las fluctuaciones son cero, forma una parábola que abre sus ramas hacia valores positivos de ω cuando $y_2 = 0$ y otra parábola que abre sus ramas hacia valores negativos de ω cuando $y_1 = 0$. Esto nos proporciona la visualización geo-

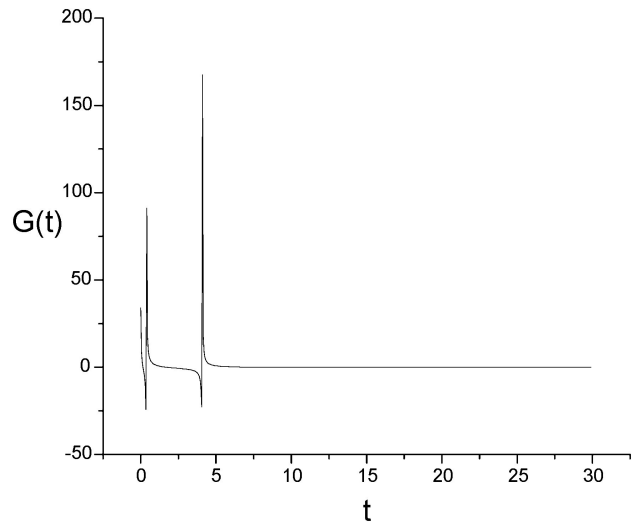


FIGURA 4. La función indicadora, $G(t)$, tiende a cero. Se calcula la expresión (45) para todos los tiempos discretos usados en las soluciones numéricas a las Ecs. (47) y (13).

métrica de una nube de puntos estado que se mueven al azar en torno al origen del espacio de fluctuaciones, en una agitación que tiende a formar un vórtice, en lugar de que se compensen las fluctuaciones positivas con negativas en y_i , $i = 1, 2$. Esta es la imagen que hace la diferencia entre un estado de equilibrio y otro que solo es estado estacionario porque no cumple con el balance detallado.

En el movimiento browniano activo que hemos considerado habrá estado estacionario siempre que exista un punto fijo estable, pero no necesariamente habrá estado de equilibrio.

7. Conclusiones

1. En este trabajo ha sido desarrollada una formulación del MBA basada en procesos estocásticos de un paso. Se ha obtenido un formalismo general para desarrollar modelos de MBA, en los cuales no es necesario postular ruidos *ad hoc*. De esta forma se resuelve la inconsistencia teórica surgida del uso indiscriminado del TFD y de la ley de equipartición de la energía para todo tiempo t y para términos de flujo muy generales.
2. El formalismo desarrollado tiene flexibilidad para aceptar una gama bastante amplia de tasas de transición, de donde resulta que su uso potencial en la modelación de fenómenos es considerable.
3. Se ha utilizado el concepto de entropía extendida para estudiar el proceso de relajación hacia un estado estacionario y ha sido posible definir una función indicadora que permite determinar cuándo se alcanza la estacionariedad. También se establece una diferencia clara con el concepto de estado de equilibrio.
4. Se recuperan las velocidades estocásticas como una herramienta teórica aplicable al estudio de fenómenos de difusión, de tal forma que, junto con la función indicadora, las velocidades estocásticas permiten explicar cómo en el estado estacionario existe una rotación aleatoria del punto estado del sistema alrededor de un punto fijo macroscópico. Para ese fin se asocia una velocidad angular que es diferente de cero cuando hay estacionariedad pero no se alcanza estado de equilibrio.
5. Con el propósito de ilustrar cómo trabaja el formalismo, se desarrollaron dos ejemplos: el de MBP, que muestra el bien conocido proceso de relajación al equilibrio; y uno de MBA que se reduce al primero cuando se hace cero un parámetro introducido expreso para ese propósito. Este último muestra todas las propiedades enumeradas en los puntos tercero y cuarto, deja claro cómo el concepto de rotación de la corriente de probabilidad, ligada a la ausencia de balance detallado, se traduce en la existencia de una velocidad angular. Una imagen tangible tomada de la mecánica.

-
1. V.A. Vasiliev, Y.M. Romanovsky, D.S. Chernavsky y V.G. Yakhno, *Autowave Processes in Kinetics Systems* (Dt. Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1987).
 2. S.S. Dukin y B.V. Derjagin, in *Surface and Colloidal Science*, edited by E. Matiejevic Vol. 7 (Wiley, 1974) p. 322.
 3. P.G. de Gennes, *Rev. Mod. Phys.* **57** (1985) 827.
 4. M. Scienbein y H. Gruler, *Bull. Mathem. Biology* **55** (1993) 585.
 5. U. Erdmann, W. Ebeling, L. Schimansky-Geier y F. Schweitzer, *Eur. Phys. J. B* **15** (2000) 105.
 6. B. Tilch, F. Schweitzer y W. Ebeling, *Physica A* **273** (1999) 299.
 7. N.G. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry* (North-Holland, Amsterdam, 1992).
 8. E. Nelson, *Phys. Rev.* **150** (1966) 1079.
 9. E. Nelson, *Quantum Fluctuations*, Princeton University Press (New Jersey 1985) and references there in.
 10. A. Castellanos (aceptado para publicación en *Il Nuovo Cimento B*).
 11. A. Castellanos, *Physica A* **316** (2002) 189.
 12. L. de la Peña, *J. Math. Phys.* **10** (1968) 1620.
 13. Blanchard Ph., Ph. Combe y W. Zheng, *Mathematical and Physical Aspects of Stochastic Mechanics, Lectures Notes in Physics* **281** (Springer-Verlag, Berlin, 1987); E. Nelson, in Ecole d'Ete de Probabilites de Saint-Flour XV-XVII, *Lectures Notes in Mathematics* **1362** P.L. Henequin ed. (Springer-Verlag, New York, 1988); M. Pavon, *J. Math. Phys.* **40** (1999) 5565.
 14. L. de la Peña y A.M. Cetto, *The Quantum Dice*, Kluwer Academic Publishers (Dordrecht, 1996) and references there in.
 15. C.W. Gardiner, *Handbook of Stochastic Methods* (Springer-Verlag 2nd. ed., Berlin, 1985).
 16. H. Hale, y H. Kosak, *Dynamics and Bifurcations*, Springer-Verlga (New York 1991).
 17. A. Castellanos, A.C.C. Coolen y L. Viana, *J. Phys. A.* **31** (1998) 6615.
 18. G.E. Uhlenbeck y L.S. Ornstein, *Physical Review* **36** (1930) 823.
 19. F. Schweitzer, B. Tilch y W. Ebeling, *Eur. Phys. J. B* **14** (1999) 157.
 20. A. Castellanos-Moreno, *Rev. Mex. Fís.* **42** (1996) 236.