



INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL

ESCUELA SUPERIOR DE FÍSICA Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

Movimiento Browniano: Método de Langevin y Simulación
Numérica

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

LICENCIADO EN FÍSICA Y MATEMÁTICAS

PRESENTA:

NORBERTO LUCERO AZUARA

DIRECTORA: Dra. Norma Sánchez-Salas

CO-DIRECTOR: Dr. José Inés Jiménez Aquino

2020

Agradecimientos

Agradezco a la vida por permitirme la realización de este trabajo, y a todos aquellos que formaron parte ello, en particular a:

- A mis asesores, Dra. Norma Sánchez Salas y Dr. José Inés Jiménez Aquino por todo el apoyo brindado en este trabajo.
- A mi familia que ha estado incondicionalmente para mí, que ha confiado, siempre me han motivado a ser una mejor persona y sobretodo por su cariño en los tiempos más difíciles.
- A mis amigos y compañeros que me han motivado día a día y han confiado en mí en todo momento.

CARTA CESIÓN DE DERECHOS AL IPN

Ciudad de México a 15 de Diciembre del 2020

El que suscribe:

C. Norberto Lucero Azuara con número de boleta 2016330169


Egresado del Programa Académico: Licenciatura en Física y Matemáticas

que se imparte en la Escuela Superior de Física y Matemáticas, manifiesta que es autor intelectual del presente trabajo de tesis titulado:

Movimiento Browniano: Método de Langevin y Simulación Numérica, El cual fue desarrollado bajo la dirección de: La Dra. Norma Sánchez Salas, y el Dr. José Inés Jiménez Aquino

Por lo anterior es mi interés manifestar que **SI** cedo los derechos del trabajo antes mencionado, al Instituto Politécnico Nacional, ello con el propósito de que lo ponga a disposición de la comunidad politécnica que requiera consultarlo con fines académicos y de investigación. Es importante aclarar que los usuarios de la información no deben reproducir el contenido textual, gráficas o datos del trabajo sin el permiso expreso del autor y/o director del trabajo. Dicho permiso puede ser solicitado a la siguiente dirección de correo electrónico: nluceroa1500@alumno.ipn.mx . Si el permiso se otorga, el usuario deberá dar el agradecimiento correspondiente y citar la fuente del mismo.

Atentamente


Norberto Lucero Azuara
Nombre y firma del alumno

Dedicatoria

A mis padres, hermanas, y toda mi familia que desde el primer día de mi carrera no han dejado de estar incondicionalmente a mi lado, en los días mas grises y en los más brillantes.

Para Juan Lucero Sánchez, esposo, padre y abuelo de una gran familia, un maravilloso ser de luz que hoy vive en mi corazón, gracias por todas tus enseñanzas.

Resumen

En este trabajo de tesis se presenta el análisis de partículas brownianas bajo la influencia de dos diferentes campos de fuerza. El método utilizado para analizar ambos casos es el mismo presentado en 1908 por Paul Langevin para resolver el problema de una partícula browniana libre. Langevin propuso un planteamiento muy transparente desde la física usando la Segunda Ley de Newton, y consiguió encontrar la misma expresión para el desplazamiento cuadrático promedio reportada por Einstein en 1905 para el movimiento browniano, mediante un procedimiento más directo y sencillo. Los casos a analizar son: el Oscilador Armónico Browniano y el movimiento browniano en un campo magnético constante, en ambos se consigue encontrar una expresión para el desplazamiento cuadrático promedio que es consistente con los resultados exactos obtenidos por los métodos estándar de los procesos estocásticos, que utilizan las propiedades estadísticas del ruido, y son iguales con estos a tiempos grandes. El análisis se complementa con la simulación numérica de las ecuaciones diferenciales estocásticas para cada uno de los casos.

Índice general

Agradecimientos	I
Resumen	IV
1. Introducción	1
2. Movimiento Browniano	5
2.1. Einstein y el Movimiento Browniano	6
2.2. Planteamiento de Langevin	8
2.3. Experimentos de Jean Perrin	12
3. Partícula Browniana en un campo de fuerza: Método de Langevin	14
3.1. Método de Langevin	16
3.2. PB en un oscilador armónico	17
3.2.1. Desplazamiento cuadrático promedio (DCP)	17
3.3. PB en un campo magnético	21
4. Simulación numérica para el Movimiento Browniano	28
4.1. Método de Euler y Heun	29

4.2. Partícula browniana con diferentes diámetros	31
4.3. Movimiento browniano en un Oscilador armónico	34
4.3.1. Caso amortiguado	35
4.3.2. Caso periódico	35
4.4. Movimiento browniano en un Campo magnético	36
5. Conclusiones	39
A. Apéndice: Teorema de Bohr-Van Leuven	41
Referencias	42

Capítulo 1

Introducción

Después de los trabajos presentados por A. Einstein [1] y P. Langevin [2], dando solución al problema del movimiento browniano (MB), los trabajos sobre el tópico de “ruido” han sido numerosos y abarcan muchas áreas del conocimiento. Algunas de las áreas en las que aparecen artículos con este tópico son: circuitos electrónicos, circulación oceánica, modelos de predicción del tiempo, emisión de luz láser, crecimiento de superficies, dinámica de poblaciones y epidemias, reacciones químicas, neuronas, etc. Lo que nos habla de la importancia y trascendencia de este tema. No es posible dar aquí una descripción sobre cada una de las áreas de aplicación del ruido. En esta introducción se mencionarán brevemente un par de ellas donde se observa que, el ruido, lejos de ser un factor inconveniente se convierte en un ingrediente indispensable para generar efectos deseables. Se puede mencionar a la resonancia estocástica [3, 4] y los motores Brownianos [5, 6, 7] como ejemplos claros de que el ruido puede ser útil. La resonancia estocástica es un fenómeno a través del cual una señal débil puede ser amplificada y optimizada con la ayuda del ruido, de la misma forma los motores Brownianos utilizan las fluctuaciones térmicas para generar un transporte direccionado (velocidad promedio diferente de cero). El transporte inducido por el ruido térmico en sistemas espacialmente periódicos está prohibido por la segunda ley de la termodinámica. Por lo que, para generar transporte, es necesario sacar al sistema fuera del equilibrio térmico vía la acción de una fuerza que puede ser de naturaleza determinista o estocástica. Es necesario otro requisito, una asimetría espacial. Los motores

Brownianos pueden ser modelados por una partícula Browniana sujeta a estas condiciones. En los últimos años, el área de investigación sobre motores Brownianos también llamados trinquetes o (“Ratchets” en inglés) ha sido motivada por lo que se observa en el transporte unidireccional de proteínas al interior de la células [8, 9], esto es, por motores moleculares reales.

Otro de los retos que han surgido en el estudio de los sistemas de tamaño pequeño del orden de micras, es la posibilidad de establecer ciertas leyes o relaciones teóricas que gobiernan el comportamiento dinámico o fuera de equilibrio de tales sistemas. En este sentido, vale la pena destacar los avances significativos que se han logrado durante las tres últimas décadas a través de los llamados teoremas de fluctuación [10] y la energética estocástica [11]. En este sentido es posible preguntarse si es posible establecer para estos sistemas de tamaño pequeño, leyes muy similares a las de la termodinámica, y si es así, bajo qué condiciones esto es posible. Éste es precisamente el propósito de la termodinámica estocástica que continúa siendo un campo de investigación muy activo hoy en día.

Regresando al tema del movimiento browniano, es importante recordar que Einstein resolvió el problema del movimiento browniano asumiendo un mecanismo molecular subyacente, y fue capaz de obtener una ecuación diferencial para la densidad de probabilidad asociada a la partícula. Esta ecuación es precisamente la ecuación de difusión porque tiene la misma estructura algebraica que la ecuación de difusión usual de la hidrodinámica clásica. Mediante su solución de la ecuación de difusión, Einstein obtuvo la expresión para el desplazamiento cuadrático promedio (DCP) para la partícula browniana dada por, $\langle x^2(t) \rangle = 2Dt$, donde $D = k_B T / 6\pi\eta a$, es el coeficiente de difusión de Einstein, k_B la constante de Boltzmann, T la temperatura del fluido, η su viscosidad y a el radio de la partícula. Con este resultado, Einstein propuso a los experimentales una cantidad que había que medir y con ello comprobar la existencia o no acerca de la constitución atómica de la materia.

Tres años después de la publicación del trabajo de Einstein, P. Langevin [2] propuso un método mucho más simple basado en la segunda ley de Newton y mediante una estrategia simple pero también ingeniosa pudo obtener la misma expresión de Einstein para el DCP. Langevin supuso que la fuerza neta que actúa sobre la partícula browniana es debido las constantes colisiones que experimenta con las moléculas de fluido, estas fuerzas son: la fuerza de fricción (ley de

Stokes) más otra fuerza de naturaleza estocástica, y por esta razón la ecuación de Langevin es una ecuación diferencial estocástica. Hasta hoy en día la solución explícita de dicha ecuación no es conocida, por obvias razones, nadie conoce la forma analítica de la fuerza estocástica para todo tiempo. Quizás no hace falta conocer dicha expresión, lo que en realidad se requiere de la ecuación de Langevin es extraer la información estadística para todo tiempo, y para ello es necesario entonces conocer las propiedades estadísticas de la fuerza estocástica o ruido. Esto fue precisamente lo que Uhlenbeck y Ornstein [12] llevaron a cabo en 1930. Partiendo de la misma ecuación de Langevin pero para la velocidad y proponiendo las propiedades estadísticas de un ruido cuya función de correlación es una delta de Dirac, lograron obtener una expresión para el DCP de la partícula browniana y mostraron que en el límite de tiempos mayores que el tiempo de relajación la expresión para el DCP es exactamente el mismo obtenido por Einstein y Langevin. Más aún en el límite de tiempos cortos mostraron que $\langle x^2(t) \rangle \sim t^2$. Y todavía más, lograron establecer las ecuaciones de Fokker-Planck para las densidades de probabilidad $P(v, t|v_0)$ y $P(x, v, t|x_0, v_0)$ y como caso particular la ecuación de difusión de Einstein. Hoy en día, prácticamente la mayoría, si no es que todos, los trabajos relacionados con el estudio del movimiento browniano se ha desarrollado tomando en cuenta las propiedades estadísticas de un ruido blanco o de color gaussianos. Se debe destacar que el estudio del movimiento browniano dió origen al desarrollo de la teoría de los procesos estocásticos, en los que el MB es solo un caso particular.

La propuesta con esta tesis no es utilizar de manera directa las propiedades estadísticas de un ruido blanco gaussiano, sino más bien utilizar la estrategia original que Langevin propuso para calcular el DCP de una partícula libre, y extenderla al estudio del oscilador armónico browniano y para el caso de la partícula browniana en presencia de un campo magnético constante. En ambos casos, se muestra que el método original de Langevin es consistente en el límite de tiempos largos (tiempos mayores que el tiempo de relajación), tal como era de esperarse. Esencialmente, el método de Langevin consiste en separar el término de ruido de su ecuación para obtener una ecuación determinista para el DCP. Mediante dos hipótesis adicionales logra resolver de manera inmediata la ecuación para obtener el mismo resultado de Einstein para el DCP. Las mismas ideas son utilizadas en esta tesis.

Es muy importante recalcar que muchos de los resultados teóricos reportados en la literatura sobre MB requieren de su validación mediante el cálculo numérico por computadora. Por lo tanto, los cálculos de simulación numérica hoy en día, es una herramienta indispensable en todos los campos de la investigación científica y por supuesto en el estudio del movimiento browniano. Las simulaciones numéricas permiten también analizar los casos no accesibles analíticamente, como por ejemplo algunos casos no lineales, etc. En el caso de la partícula browniana, la ecuación de Langevin es una ecuación de segundo orden en la derivada temporal para la posición y de primer orden para la velocidad, para las cuales existen varias técnicas para su simulación. En este trabajo se realizan simulaciones numéricas para diferentes escenarios del movimiento browniano que se presentan en el capítulo 4.

Finalmente, cabe mencionar aquí que los resultados incluidos en los capítulos 3 y 4, son resultados originales que han sido enviados para su publicación en dos artículos de enseñanza, uno está publicado en *European Journal of Physics* [13] y el segundo se encuentra en prensa en la *Revista Mexicana de Física E* [14].

Este trabajo de tesis está organizado de la siguiente manera: en el Capítulo 2 se presenta una introducción al movimiento browniano. En el Capítulo 3 se realiza un análisis teórico, usando el método original de Langevin, y el estudio del movimiento browniano de una partícula para dos casos; en el primero se considera a la PB bajo la influencia de un fuerza tipo oscilador armónico y el segundo bajo la acción de un campo magnético constante. En el capítulo 4 se muestran los resultados de las simulaciones numéricas de los casos analizados en capítulo 3. Finalmente, en el capítulo 5 se enuncian las conclusiones. También se ha incluido un apéndice que incluye algunos cálculos algebraicos.

Capítulo 2

Movimiento Browniano

El movimiento browniano es el movimiento en zigzag que realizan las partículas pequeñas sumergidas en un fluido, que se puede observar a través de un microscopio óptico. La historia de este movimiento puede decirse que inicia en 1827, cuando este movimiento fue estudiado, por primera vez, de forma sistemática y exhaustiva por Robert Brown, un famoso botánico inglés. Del trabajo publicado por Brown [15] presentando sus observaciones a la explicación de este fenómeno pasó casi un siglo, y ésta iba a darse al interior del descubrimiento de uno de los hallazgos más importantes de la física, la existencia de los átomos. Después de R. Brown, se investigaron las posibles causas de este movimiento errático y se dieron varias posibilidades, hasta que a finales de los 1880s, G. Gouy, un científico francés, concluyó, basado en cuidadosos experimentos que, la causa de este movimiento era inherente al fluido y no se debía a algún agente externo, de acuerdo con la teoría cinética de la materia. Aunque Gouy tenía clara la idea, no proporcionó un resultado teórico concreto que explicara el fenómeno. Todo esto sucedía mientras ya se habían sentado las bases de la teoría cinética molecular, por Clausius, Boltzmann y Maxwell, principalmente. La última parte del siglo XIX fue una época de dudas y controversias entre los físicos, químicos y filósofos de la ciencia. De un lado estaban científicos (E. Mach y W. Ostwald) con mucha reputación que rechazaban la idea de que los átomos existieran y por otro los defensores de la teoría cinética molecular.

Fue A. Einstein en uno de sus artículos de su *Annus Mirabilis* (1905), quien dio una explicación

del fenómeno, al resolver el conflicto entre las altas velocidades de las partículas, calculadas según el principio de equipartición, y sus modestos desplazamientos medios observados. Sentando así las bases de la Física atómico-molecular del siglo XX así como de la Matemática pura de los procesos estocásticos. La teoría se amplió con los trabajos de Smoluchowski presentados en 1906, con su modelo de caminante aleatorio, y de Langevin en 1908, con una propuesta de solución más intuitiva desde la Física, basada en la segunda Ley de Newton. Y, fueron J. Perrin en 1908 [16] y T. Svedberg en 1912 los que finalmente demostraron con experimentos, la existencia respectiva de los átomos y las moléculas.

Hoy en día existe mucha información relacionada con el MB y el alcance de sus aplicaciones es muy amplio, tal como puede verificarse en la literatura científica. La teoría del movimiento browniano no sólo se aplica en la física sino también a la química, biología, matemáticas, finanzas, medicina, cosmología, geofísica, neurología, en las ciencias sociales, etc.

En este capítulo se expone, en la primera sección, un resumen de los principales resultados que Einstein obtuvo de su primer artículo sobre movimiento browniano, a continuación se exponen las ideas usadas por Langevin para abordar el problema y, finalmente, se enuncian algunas comentarios sobre la parte experimental llevada a cabo por Jean Perrin para corroborar, entre otras cosas, que los resultados de Einstein eran correctos.

2.1. Einstein y el Movimiento Browniano

En 1905 A. Einstein publicó su primer artículo sobre movimiento browniano con el siguiente título "*On the Movement of Small Particles Suspended in a Stationary Liquid Demanded by the Molecular-Kinetic Theory of Heat*". La primera oración dice "En este documento se mostrará. . . los cuerpos de tamaño microscópicamente visibles suspendidos en líquido realizarán un movimiento de tal magnitud que se pueden observar fácilmente en un microscopio debido a los movimientos moleculares del calor ". Einstein concluye la introducción de dos párrafos con "Si el movimiento discutido aquí realmente se puede observar. . . es posible una determinación exacta de las dimensiones atómicas reales. Por otro lado, si se demostrara que la predicción de

este movimiento es incorrecta, se proporcionaría un argumento de peso en contra de la teoría cinética molecular del calor " .

Concluye el artículo con “. . . la relación se puede utilizar para la determinación de N ;" N aún no tenía nombre pero se trataba del número de Avogadro. La última oración del artículo dice: “Se espera que algún investigador pueda resolver pronto el problema que aquí se plantea, que es tan importante en relación con la teoría del calor”. Ese investigador sería Perrin.

El principal resultado del trabajo de Einstein, en su artículo de 1905, sobre movimiento browniano puede resumirse de la siguiente manera: el desplazamiento cuadrático promedio $\langle x^2 \rangle$ que experimenta una partícula Browniana esférica, de radio a , en el tiempo t está dado por

$$\langle x^2 \rangle = \left(\frac{RT}{3\pi N_{av} a \eta} \right) t, \quad (2.1)$$

donde T es la temperatura, η es la viscosidad del fluido, R es la constante de los gases y N_{av} es el número de Avogadro. Debido a que $\langle x^2 \rangle$, t , a y η son cantidades medibles, el número de Avogadro puede ser determinado usando (2.1).

Einstein tenía una idea clara de los órdenes de magnitud que harían visibles los movimientos bajo un microscopio. Tomando un ejemplo explícito de una partícula browniana esférica de una micra de radio, mostró que la raíz cuadrada del desplazamiento cuadrático promedio, $\langle x^2 \rangle^{1/2}$, debe ser del orden de unas pocas micras cuando se observa durante un periodo de un minuto.

Dos pasos intermedios de su cálculo en este documento también son extremadamente importantes. Primero, obtuvo

$$\gamma D = k_B T = RT/N_{av} \quad (2.2)$$

donde γ es el coeficiente de fricción de la fuerza de arrastre, D es la constante de difusión y T es la temperatura. Se puede observar que D es una medida de las fluctuaciones en las posiciones de la partícula browniana mientras que γ es una medida de la disipación de energía; por lo tanto, la fórmula (2.2) es un caso especial de un teorema más general, llamado teorema de fluctuación-disipación, el cuál fue derivado casi medio siglo después.

El segundo resultado importante fue su derivación de la ecuación de difusión

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \quad (2.3)$$

con $P(x, t)$, la distribución de probabilidad de la posición x de la partícula browniana en el tiempo t . Aunque ecuación de difusión fue ampliamente utilizada ya en el siglo XIX en el contexto de las teorías del continuo, la derivación de Einstein estableció un vínculo entre la caminata aleatoria de una sola partícula y la difusión de muchas partículas.

Para la condición inicial $P(x, 0) = \delta(x)$, donde $\delta(x)$ es la llamada función delta de Dirac, la solución de la ecuación de difusión (2.3) está dada por

$$P(x, t) = \frac{1}{[2\pi\sigma^2(t)]^{1/2}} e^{-x^2/(2\sigma^2)} \quad (2.4)$$

donde $\sigma^2(t) = 2Dt$. Por lo tanto, la raíz del desplazamiento cuadrático promedio $\langle x^2 \rangle^{1/2}$, que corresponde al ancho de la gaussiana, es proporcional a \sqrt{t} .

El artículo de 1905 de Einstein sobre el movimiento browniano no fue el único artículo que escribió sobre este tema. De hecho, en la opinión de los principales historiadores de la ciencia, la tesis doctoral de Einstein, que se publicó en 1906, es quizás una contribución más importante a la teoría del movimiento browniano que su artículo de 1905. El enfoque de Einstein ha sido generalizado por varios sus contemporáneos, incluidos Fokker, Planck, Smoluchowski entre otros. Este marco teórico general es ahora llamado enfoque Fokker-Planck [17]. En este enfoque, se trata con una ecuación diferencial parcial determinista para una densidad de probabilidad.

2.2. Planteamiento de Langevin

En 1908, el científico francés Paul Langevin [18] propuso un método diferente de abordar el problema del MB, su planteamiento parte de la segunda Ley de Newton para una PB, esto es, $F = ma$, donde m es la masa de la PB y a su aceleración. Según la propuesta de Langevin el

movimiento observado para estas partículas se debe a una fuerza resultante compuesta por las dos fuerzas siguientes:

(i) Dentro del contexto de la hidrodinámica clásica una partícula en movimiento en un fluido experimenta una fuerza dada por la ley de Stokes. Para el caso de la PB que, aunque es pequeña ($\sim 10^{-6} m$) a su vez es muy grande comparada con las moléculas del fluido, por lo que es razonable considerar que está sujeta a esta fuerza, dada por $f = -\alpha v$, donde $\alpha = 6\pi \eta r$, es el coeficiente de fricción η la viscosidad del fluido y r el radio de la PB. Langevin se percató de que esta fuerza no era suficiente para explicar el movimiento de una PB, por lo que a su planteamiento agrego otra fuerza.

(ii) La PB es lo suficientemente pequeña de modo que las moléculas del fluido colisionan con ella y ejercen un efecto neto en el movimiento de ésta. Así que Langevin propuso una fuerza efectiva de carácter aleatorio que depende el tiempo denotada por $\Gamma(t)$, donde agrupa todas las interacciones de las moléculas ($\sim 10^{23}$) del fluido con la PB.

De esta forma, la ecuación dinámica para describir el MB bajo el planteamiento de Langevin queda dada por

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -\alpha \frac{dx}{dt} + \Gamma(t). \quad (2.5)$$

Ésta expresión es conocida como la *Ecuación de Langevin* y el término $\Gamma(t)$ recibe varios nombres como: ***fuerza fluctuante***, ***fuerza estocástica***, ***fuerza de Langevin***, ***ruido estocástico*** o simplemente ***ruido***. El valor exacto de la fuerza fluctuante en cada instante de tiempo, es prácticamente imposible de determinar por el número muy grande de interacciones que ocurren, sin embargo, como se mencionó anteriormente, hay un efecto neto de estas interacciones en el desplazamiento de la PB, tal como se muestra en la Fig. 2.1. Debido al carácter aleatorio del ruido $\Gamma(t)$, la ec. (2.5) ya no representa una ecuación diferencial ordinaria con solución determinista, sino una ecuación diferencial estocástica cuya solución no es posible calcular explícitamente.

El objetivo de Langevin era recuperar el resultado obtenido por Einstein para el desplazamiento cuadrático promedio $\langle x^2(t) \rangle$, por lo que al tener una ecuación estocástica de segundo orden,

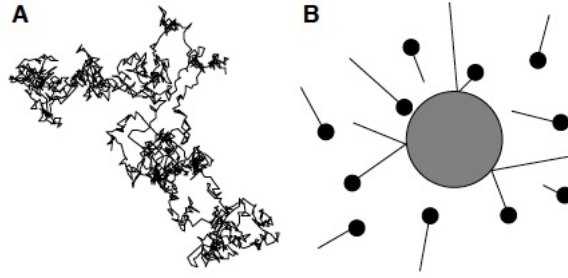


Figura 2.1: Representación esquemática del movimiento browniano.

para la posición de la PB, Langevin idea un procedimiento para lograr su objetivo, mismo que se describe, por completos en la primera sección del capítulo 3. Donde logra obtener el resultado

$$\langle x^2 \rangle - \langle x_0^2 \rangle = 2 \frac{k_B T}{\alpha} t = 2Dt, \quad (2.6)$$

Que coincide con el resultado obtenido por Einstein.

Escalas de tiempo para la validez de la ecuación de Langevin

En el MB, las moléculas del fluido que colisionan incesantemente con la PB se mueven mucho más rápido que dicha partícula, por lo tanto es necesario distinguir ciertas escalas de tiempo para las cuales es válida la ecuación propuesta por Langevin, ver Fig. 2.1. Estas escalas de tiempo se definen como sigue:

(i). **Tiempo de colisión molecular** τ_c . De acuerdo con la teoría cinética molecular, esta escala de tiempo se puede estimar a través de la energía cinética promedio de las moléculas dada por $\langle E_c \rangle = (1/2)m\langle v^2 \rangle = (1/2)k_B T$. De esta manera tenemos que $\tau_c \sim d/\sqrt{k_B T/m}$, donde d es la distancia promedio que recorre la molécula justo antes de colisionar con alguna otra. Si se considera $d = a$ con a el radio promedio de una molécula entonces, para un radio típico de 10^{-10} m, y como fluido el agua a temperatura normal $T = 300$ K, obtenemos un tiempo estimado de $\tau_c \sim 10^{-13}$ s. Durante este tiempo, la PB permanece prácticamente en reposo, por lo que τ_c representa también el tiempo de colisión entre la PB con las moléculas del fluido. El inverso de esta escala de tiempo se puede interpretar como la frecuencia de colisión de la moléculas con la PB, que en este caso es del orden de 10^{13} colisiones por segundo. Este efecto acumulado de tantas colisiones por segundo hacen que la PB pueda desplazarse de un punto a

otro de manera azarosa o irregular. Es evidente que para tiempos de observación t de la PB, del orden de segundos, se cumple que $t \gg \tau_c$. Por otro lado, si consideramos dos tiempos distintos de observación t y t' en la dinámica de la PB, es razonable suponer que para la diferencia de tiempos tales $|t - t'| \gg \tau_c$, la función de correlación del ruido $\langle \Gamma(t)\Gamma(t') \rangle = 0$. Esto significa que las colisiones que experimenta la PB con las moléculas del fluido al tiempo t no tiene nada que ver con las colisiones que experimenta al tiempo t' , es decir, son independientes, de manera que en el límite de $\tau_c \rightarrow 0$ se tiene que $\langle \Gamma(t)\Gamma(t') \rangle = \lambda\delta(t - t')$. Esta expresión cuantifica la correlación instantánea del ruido de intensidad λ , o lo que es lo mismo que no tiene memoria.

(ii). **Tiempo de relajación del momento lineal** τ_r . La dinámica de la PB también experimenta una fuerza de fricción que produce el amortiguamiento de la partícula y como consecuencia la relajación de su momento lineal $p = mv$. De acuerdo con la ley de Stokes, la fuerza de fricción está dada por $f = -\alpha v$, donde $\alpha > 0$ es el coeficiente de fricción, para el caso de una partícula esférica $\alpha = 6\pi\eta r$, siendo r el radio de la PB. De acuerdo con la segunda ley de Newton y para tiempos de observación $t \gg \tau_c$, la velocidad de la PB decae como $v(t) = v_0 e^{-t/\tau_r}$, donde v_0 es la velocidad inicial y $\tau_r = m/\alpha$ el tiempo de relajación. Para esferas en agua el valor de este tiempo de relajación es del orden de $\tau_r \sim 10^{-8}$ s, que es mucho mayor que el tiempo de colisión, es decir que, $\tau_c \ll \tau_r$. Esto justifica la utilización de la fuerza de fricción de Stokes en la dinámica de la PB.

(iii) **Tiempo Browniano o tiempo difusivo** τ_B . Éste se define como el tiempo que tarda la PB en viajar una distancia igual a su radio r , es decir, $\tau_B \sim r^2/D$ que es del orden de varios segundos. En conclusión, la dinámica de la PB se lleva a cabo tomando en cuenta la separación de las escalas de tiempo $\tau_c \ll \tau_r \ll \tau_B$, para los cuales es válida la ecuación de Langevin (2.5).

Aunque los resultados teóricos reportados por Einstein y Langevin fueron exitosamente corroborados experimentalmente, todavía quedaron varias preguntas que responder, desde el punto de vista matemático. Por ejemplo, ¿cómo entender o explicar la presencia de una función aleatoria en el tiempo que es continua pero no diferenciable en la ecuación de Langevin? El desplazamiento cuadrático promedio (DCP) Ec. (2.6), se obtuvo en el régimen de tiempos largos, es decir, $t \gg \tau_r$. luego entonces ¿Qué se puede decir respecto al régimen de tiempos cortos $t \ll \tau_r$? ¿Por qué la metodología propuesta por Einstein, que es completamente distinta a la de Langevin,

conducen al mismo resultado para el DCP? ¿Qué relación puede existir entre ambas? etc., etc. Éstas y otras preguntas fueron encontrando respuesta con el desarrollo de la matemática de las funciones aleatorias, hoy llamada teoría de procesos estocásticos. En 1930 Leonard Ornstein y George Uhlenbeck [12] desarrollaron un método más completo para resolver el problema del MB, tomando en cuenta la ecuación de Langevin para la velocidad. En este esquema fueron capaces de obtener las densidades de probabilidad para la posición y velocidad así como las ecuaciones de Fokker-Planck correspondientes. Por esta razón la ecuación de Langevin asociada a la velocidad se le conoce como proceso estocástico de Ornstein-Uhlenbeck (OU).

En la siguiente sección se harán algunas anotaciones acerca de la parte experimental de MB desarrollada por Jean Perrin y sus estudiantes.

2.3. Experimentos de Jean Perrin

El físico francés Jean Perrin (1870-1942) ocupa una posición fundamental en la historia del movimiento browniano. Generalmente se le atribuye el haber corroborado la teoría de Einstein-Smoluchowski mediante sus experimentos, pero igualmente importante fue su papel como propagandista del atomismo. El trabajo anterior de Perrin había sido en el campo de los rayos catódicos y los rayos X. Tras un intervalo de varios años, durante los cuales se ocupó de organizar un curso de química física en la Sorbona, regresó al laboratorio en 1903 y comenzó a trabajar en soluciones coloidales.

El interés de Perrin por el movimiento browniano se demostró claramente por primera vez en una conferencia que dio a la Société de Philosophie en 1906 [19]. En esta conferencia discutió el significado y los límites de validez de la Segunda Ley de la Termodinámica, y planteó la cuestión de su compatibilidad con las hipótesis moleculares. Boltzmann había sostenido que la Segunda Ley es perfectamente consistente con la teoría cinética siempre que se exija únicamente que la ley sea estadísticamente válida; pueden ocurrir fluctuaciones que corresponden a disminuciones de entropía, pero tan raramente que es extremadamente improbable que se observen en cualquier experimento real. Los críticos de la teoría cinética, como el matemático Ernst, argumentaron

que esta validez “meramente” estadística no era suficientemente buena. La irreversibilidad es una propiedad fundamental de los procesos naturales, y cualquier hipótesis molecular, o quizás todas las hipótesis moleculares concebibles basadas en la mecánica newtoniana, que permita cualquier excepción debe ser incorrecta.

La verificación experimental final de la teoría propuesta por Einstein y Langevin estuvo en manos de Jean Perrin y su discípulo M. Chaudesaigues [16], quienes entre los años 1908-1911 trabajaron en experimentos para demostrar que el DCP era precisamente una línea recta. Uno de los factores que los llevaron a tener éxito en su objetivo de forma muy exacta fue que pudieron obtener una solución coloidal con partículas dispersas del tamaño adecuado, las cuáles obtuvieron usando gutagamba, un extracto de goma, que forma partículas esféricas cuando se disuelven en agua. Perrin y Chaudesaigues pudieron medir la pendiente de la recta y, con los datos de la temperatura y la viscosidad del fluido así como las dimensiones de la partícula, dedujeron de la fórmula de Einstein que el valor del número de Avogadro debería ser igual a $6,4 \times 10^{23}$. Actualmente el valor más preciso de este número es de $6,02 \times 10^{23}$. Perrin fue galardonado con el premio Nobel de Física en 1926, por su trabajo sobre la estructura discontinua de la materia, y especialmente por su descubrimiento del equilibrio de sedimentación.

En un trabajo reciente, Newburg *et al.* [20] presentan una propuesta de realización de un experimento de enseñanza que permite corroborar los resultados obtenidos por Perrin para el MB. Mediante su configuración hacen mediciones para partículas brownianas de distintos diámetros y reportan los desplazamientos cuadráticos promedios para cada caso. Usando de referencia los resultados reportados en este trabajo, en el capítulo 4 sección 4.2 se muestra el mismo “experimento” mediante simulación numérica.

Capítulo 3

Partícula Browniana en un campo de fuerza: Método de Langevin

Como ya se mencionó en el capítulo anterior, el objetivo principal del artículo de Langevin de 1908, que ahora se considera como el nacimiento de las ecuaciones diferenciales estocásticas, era encontrar el mismo resultado de Einstein para el desplazamiento cuadrático promedio, de una forma más directa desde la Física usando la Segunda Ley de Newton. Como se mostrará de forma explícita en este capítulo, el método de Langevin es más simple porque es fácil escribir la segunda Ley de Newton una vez que se conocen las fuerzas y, aunque, la estrategia de Langevin no da la información estadística completa del problema, sí proporciona las cantidades importantes de forma directa y fácil para el caso de una PB libre y, como se comprobará en este capítulo, también para otros casos.

Actualmente, la ecuación de Langevin o una ecuación de tipo Langevin se usa ampliamente en diversos sistemas en diferentes campos como la física, la química, la biología, etc. Después de la publicación del trabajo de Langevin, otras contribuciones destacadas a la teoría del movimiento browniano aparecieron en una colección de artículos sobre ruido y procesos estocásticos [4]. Prácticamente todos los trabajos académicos y de investigación relacionados con el estudio del movimiento browniano se han desarrollado utilizando el método estándar en el contexto de la ecuación de Langevin o la ecuación de Fokker-Planck teniendo en cuenta las propiedades

estadísticas gaussianas del ruido [21, 22]. Existe una variedad de métodos para resolver las ecuaciones de Langevin y Fokker-Planck, por ejemplo, transformadas de Laplace, transformadas de Fourier, método de función de Green, entre otros.

En este capítulo se abordarán los problemas del oscilador armónico browniano (OAB) y el de una partícula browniana cargada en un campo magnético (CMB). El primero fue resuelto explícitamente por Chandrasekhar en 1943, donde el autor utiliza las propiedades estadísticas del ruido para resolverlo de forma exacta y, el segundo por Taylor[23] y Kursunoglu [24], usando la misma metodología. Por lo que el objetivo en este trabajo es resolverlos mediante un procedimiento diferente, esto es, el propuesto por Langevin para resolver el de la partícula libre que, como se indicó, es un procedimiento que aunque no proporciona toda la información estadística de los problemas sí permite obtener algunas cantidades estadísticas de una forma más directa.

Para el OAB se analizan dos casos: el amortiguado y el periódico, donde se obtienen soluciones aproximadas pero consistentes con las exactas y ambas coinciden a tiempos largos. Para el segundo problema (CMB) se escribe la ecuación de Langevin para una partícula cargada en un campo magnético constante, el cual se considera que apunta hacia el eje z , debido a esto, la ecuación en tres dimensiones se divide en dos partes, una para el eje z y otra para el plano $x - y$ con dinámicas diferentes, a lo largo del eje z la partícula se comporta como una partícula libre mientras que en el plano $x - y$ las ecuaciones están acopladas y a primera vista no parece posible usar la metodología de Langevin, pero aplicando una transformación al plano complejo y considerando como válido el teorema de Bohr van-Leeuwen junto con las hipótesis de Langevin se mostrará que sí es posible resolver este problema. Estos resultados son una aportación original de este trabajo de tesis y ya fueron publicados [13].

Para hacer más ágil la lectura de las soluciones a los problemas que se presentan en este capítulo en la primera sección se muestra la estrategia propuesta por Langevin para resolver el problema del MB para una partícula libre. A continuación se presenta el análisis del método de Langevin aplicado al caso de una partícula browniana bajo la influencia de una fuerza de tipo oscilador armónico en el caso amortiguado y periódico. En la última sección del capítulo se presenta la solución para el caso de una partícula browniana en un campo magnético.

3.1. Método de Langevin

En esta sección se expone de forma sucinta la estrategia aplicada por Langevin para resolver el problema del MB de una partícula libre. Se parte de la ecuación de Langevin introducida en el capítulo 2, Ec. (2.5).

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -\alpha \frac{dx}{dt} + \xi(t).$$

El procedimiento es el siguiente, se multiplica a la Ec. (2.5) por x

$$mx \frac{d^2 x}{dt^2} = -\alpha x \frac{dx}{dt} + x\xi(t). \quad (3.1)$$

Ahora, considerando las siguientes relaciones

$$\frac{d^2 x^2}{dt^2} = 2x \frac{d^2 x}{dt^2} + 2 \left(\frac{dx}{dt} \right)^2, \quad \frac{dx^2}{dt} = 2x \frac{dx}{dt}, \quad (3.2)$$

y tomando el promedio sobre un ensamble de partículas, se obtiene lo siguiente

$$\frac{m}{2} \frac{d^2 \langle x^2 \rangle}{dt^2} - m \langle v^2 \rangle = \frac{\alpha}{2} \frac{d \langle x^2 \rangle}{dt} + \langle x \xi(t) \rangle. \quad (3.3)$$

Langevin considera una primera hipótesis, que el promedio $\langle x \xi(t) \rangle = 0$, lo cual significa que la trayectoria promedio $\langle x \rangle$ es independiente del ruido $\xi(t)$. Hace una segunda hipótesis, considera válido el principio de equipartición de energía, esto es, supone que las partículas Brownianas están en equilibrio térmico con el fluido a la temperatura T y, se debe satisfacer que $m \langle v^2 \rangle / 2 = k_B T / 2$. De esta manera la Ec. (3.3) se reduce a

$$\frac{m}{2} \frac{d^2 \langle x^2 \rangle}{dt^2} - \frac{\alpha}{2} \frac{d \langle x^2 \rangle}{dt} = k_B T. \quad (3.4)$$

Esta expresión es una ecuación diferencial determinista y se puede demostrar que la solución para $\frac{d \langle x^2 \rangle}{dt}$ es igual a

$$\frac{d \langle x^2 \rangle}{dt} = \frac{2k_B T}{\alpha} + C e^{-\gamma t}, \quad (3.5)$$

donde $\gamma = m/\alpha$. Langevin estimó que la exponencial en la Ec. (3.5) tiende a cero para un tiempo de relajación $\tau_r = 1/\gamma$ del orden de 10^{-8} s, o equivalentemente para tiempos tales que $\gamma t \gg 1$, o $t \gg \tau_r$, por lo que el término $\frac{d\langle x^2 \rangle}{dt}$ evoluciona rápidamente a un valor constante, esto es $\frac{d\langle x^2 \rangle}{dt} = \frac{2k_B T}{\alpha}$. Integrando nuevamente se concluye que

$$\langle x^2 \rangle - \langle x_0^2 \rangle = 2\frac{k_B T}{\alpha}t = 2Dt, \quad (3.6)$$

que corresponde al mismo resultado obtenido por Einstein, donde $D = \frac{k_B T}{\alpha} = \frac{k_B T}{6\pi\eta r}$. Como se puede concluir, la estrategia de Langevin es simple y directa. Y es posible obtener el mismo resultado que el obtenido por Einstein. A continuación se aplicará este método al caso de movimiento browniano en un oscilador armónico.

3.2. PB en un oscilador armónico

Como ya se mencionó previamente, el problema del oscilador armónico browniano (OAB) fue resuelto por Chandrasekhar en 1943 [25], utilizando el método estándar, considerando las propiedades estadísticas de un ruido blanco gaussiano. En esta sección se presenta la solución a este problema aplicando la estrategia de Langevin[14].

3.2.1. Desplazamiento cuadrático promedio (DCP)

Para encontrar el DCP del OAB, primero se obtiene una ecuación diferencial determinista para la varianza $\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ y, a partir de la solución para σ_x^2 se obtiene directamente la solución para el DCP. Se parte de la ecuación de Langevin del OAB dada por

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + \gamma \frac{dx}{dt} + \omega^2 x = \frac{1}{m} \xi(t), \quad (3.7)$$

donde $\omega^2 = k/m$ es la frecuencia característica del oscilador.

Se multiplica por x la Ec. (3.7), se toman en cuenta las relaciones (3.2) y se aplica el promedio

del ensamble para obtener

$$\frac{d^2\langle x^2 \rangle}{dt^2} - 2\langle v^2 \rangle + \gamma \frac{d\langle x^2 \rangle}{dt} + 2\omega^2 \langle x^2 \rangle = \frac{2}{m} \langle x\xi(t) \rangle. \quad (3.8)$$

Considerando una vez más la hipótesis $\langle x\xi(t) \rangle = 0$, la ecuación anterior se reduce a

$$\frac{d^2\langle x^2 \rangle}{dt^2} + \gamma \frac{d\langle x^2 \rangle}{dt} + 2\omega^2 \langle x^2 \rangle = 2\langle v^2 \rangle, \quad (3.9)$$

la cual corresponde a una ecuación diferencial determinista para $\langle x^2 \rangle$.

Por otro lado, para obtener la ecuación determinista asociada a $\langle x \rangle^2$, debe de considerarse que el promedio de la Ec. (3.7) debe coincidir con la ecuación determinista y por tanto $\langle \xi(t) \rangle = 0$.

Así que

$$\frac{d^2\langle x \rangle}{dt^2} + \gamma \frac{d\langle x \rangle}{dt} + \omega^2 \langle x \rangle = 0, \quad (3.10)$$

Multiplicando esta ecuación por $\langle x \rangle$ y mediante un proceso similar al desarrollado previamente, se llega a que

$$\frac{d^2\langle x \rangle^2}{dt^2} + \gamma \frac{d\langle x \rangle^2}{dt} + 2\omega^2 \langle x \rangle^2 = 2\langle v \rangle^2. \quad (3.11)$$

Si se resta la Ec. (3.11) de (3.9) se tiene de inmediato que

$$\frac{d^2\sigma_x^2}{dt^2} + \gamma \frac{d\sigma_x^2}{dt} + 2\omega^2 \sigma_x^2 = 2(\langle v^2 \rangle - \langle v \rangle^2). \quad (3.12)$$

Considerando ahora la hipótesis de Langevin relacionada con el teorema de equipartición de la energía en equilibrio térmico, caracterizado por la distribución Maxwell, entonces el promedio $\langle v \rangle = 0$ y el segundo momento $\langle v^2 \rangle = k_B T/m$. De esta manera la Ec.(3.12) se reduce a

$$\frac{d^2\sigma_x^2}{dt^2} + \beta \frac{d\sigma_x^2}{dt} + 2\omega^2 \sigma_x^2 = 2 \frac{k_B T}{m}, \quad (3.13)$$

La cual es una ecuación determinista asociada a la varianza $\sigma_x^2(t)$. La solución de esta ecuación puede ser calculada utilizando el método de coeficientes indeterminados. Primero, se resuelve

la ecuación homogénea dada por:

$$\frac{d^2\sigma_{xh}^2}{dt^2} + \beta\frac{d\sigma_{xh}^2}{dt} + 2\omega^2\sigma_{xh}^2 = 0. \quad (3.14)$$

A continuación se hará la separación entre el caso amortiguado ($\beta > 2\omega$) y el periódico ($\beta < 2\omega$).

Caso amortiguado ($\beta > 2\omega$).

Para el caso amortiguado se considera ($\beta > \sqrt{8}\omega$) y la solución de (3.14) queda dada por

$$\sigma_{xh}^2 = C_1 e^{(-\frac{\beta}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{\beta^2 - 8\omega^2})t} + C_2 e^{(-\frac{\beta}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{\beta^2 - 8\omega^2})t}. \quad (3.15)$$

Ahora la solución particular es una constante $\sigma_{xp}^2 = A$, la cual es sustituida en la Ec.(3.13) para obtener:

$$\sigma_{xp}^2 = \frac{k_B T}{m\omega^2}. \quad (3.16)$$

De esta manera, la solución de la Ec.(3.13) está dada por $\sigma_x^2 = \sigma_{xh}^2 + \sigma_{xp}^2$ y así:

$$\sigma_x^2(t) = C_1 e^{(-\frac{\beta}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{\beta^2 - 8\omega^2})t} + C_2 e^{(-\frac{\beta}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{\beta^2 - 8\omega^2})t} + \frac{k_B T}{m\omega^2}. \quad (3.17)$$

Las constantes C_1 y C_2 pueden ser obtenidas de las condiciones iniciales $\sigma_x^2(0) = 0$ and $\frac{d\sigma_x^2(0)}{dt} = 0$ así que:

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{k_B T \beta}{2m\omega^2 \sqrt{\beta^2 - 8\omega^2}} - \frac{k_B T}{2m\omega^2}, \\ C_2 &= -\frac{k_B T \beta}{2m\omega^2 \sqrt{\beta^2 - 8\omega^2}} - \frac{k_B T}{2m\omega^2}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Así la solución de la Ec.(3.13) puede ser escrita como:

$$\sigma_x^2(t) = \frac{k_B T}{m\omega^2} \left\{ 1 - e^{-\frac{1}{2}\beta t} \left(2 \sinh^2 \frac{1}{4} \bar{\beta}_1 t + \frac{\beta}{\bar{\beta}_1} \sinh \frac{1}{2} \bar{\beta}_1 t + 1 \right) \right\}, \quad (3.19)$$

Donde $\bar{\beta}_1 = \sqrt{\beta^2 - 8\omega^2}$. En este caso el DCP queda dado por

$$\langle x^2(t) \rangle = \langle x(t) \rangle^2 + \frac{k_B T}{m\omega^2} \left\{ 1 - e^{-\frac{1}{2}\beta t} \left(2 \sinh^2 \frac{1}{4} \bar{\beta}_1 t + \frac{\beta}{\bar{\beta}_1} \sinh \frac{1}{2} \bar{\beta}_1 t + 1 \right) \right\}, \quad (3.20)$$

y la solución para el promedio $\langle x(t) \rangle$ viene de la solución explícita de Ec.(3.10), que es:

$$\langle x(t) \rangle = x_0 e^{-\frac{1}{2}\beta t} \left(\cosh \frac{1}{2} \beta_1 t + \frac{\beta}{\beta_1} \sinh \frac{1}{2} \beta_1 t \right) + \frac{2v_0}{\beta_1} e^{-\frac{1}{2}\beta t} \sinh \frac{1}{2} \beta_1 t, \quad (3.21)$$

siendo $\beta_1 = \sqrt{\beta^2 - 4\omega^2}$, y x_0, v_0 las condiciones iniciales para la posición y la velocidad, respectivamente. La ecuación (3.20), obtenida mediante el planteamiento de Langevin es similar a la obtenida por Chandrasekhar (solución exacta [25]) dada por

$$\langle x^2(t) \rangle_c = \langle x(t) \rangle^2 + \frac{k_B T}{m\omega^2} \left\{ 1 - e^{-\beta t} \left(2 \frac{\beta^2}{\beta_1^2} \sinh^2 \frac{1}{2} \beta_1 t + \frac{\beta}{\beta_1} \sinh \beta_1 t + 1 \right) \right\}, \quad (3.22)$$

donde $\langle x(t) \rangle$ que es la misma que la Ec. (3.21).

Como se puede ver la estructura de la ecuación (3.20) es similar pero no igual a la ecuación (3.22), porque el parámetro $\bar{\beta}_1 \neq \beta_1$, y el cociente $\frac{\beta^2}{\beta_1^2}$ aparece en la Ec.(3.22), pero no en la Ec.(3.20). En el capítulo 4, sección 4.3, se grafican ambas soluciones para compararlas junto a la simulación numérica de la ecuación (3.7).

Caso periódico ($\beta < 2\omega$).

Para el oscilador armónico en el caso periódico, después de un poco de álgebra se puede mostrar que la solución de la Ec. (3.13) puede ser escrita como

$$\sigma_x^2(t) = \frac{k_B T}{m\omega^2} \left\{ 1 - e^{-\frac{1}{2}\beta t} \left(-2 \sin^2 \frac{\sqrt{2}}{2} \bar{\omega}_1 t + \frac{\beta}{\sqrt{8} \bar{\omega}_1} \sin \sqrt{2} \bar{\omega}_1 t + 1 \right) \right\}, \quad (3.23)$$

donde $\bar{\omega}_1 = \sqrt{\omega^2 - \frac{\beta^2}{8}}$, y entonces el DCP será

$$\langle x^2(t) \rangle = \langle x(t) \rangle^2 + \frac{k_B T}{m\omega^2} \left\{ 1 - e^{-\frac{\beta}{2}t} \left(-2 \sin^2 \frac{\sqrt{2}}{2} \bar{\omega}_1 t + \frac{\beta}{\sqrt{8}\bar{\omega}_1} \sin \sqrt{2} \bar{\omega}_1 t + 1 \right) \right\}, \quad (3.24)$$

siendo el valor medio

$$\langle x(t) \rangle = x_0 e^{-\frac{1}{2}\beta t} \left(\cos \omega_1 t + \frac{\beta}{2\omega_1} \sin \omega_1 t \right) + \frac{v_0}{\omega_1} e^{-\frac{1}{2}\beta t} \sin \omega_1 t, \quad (3.25)$$

con $\omega_1 = \sqrt{\omega^2 - \frac{\beta^2}{4}}$. Por el otro lado, el DCP propuesto por Chandrasekhar en el caso periódico está dado por

$$\langle x^2 \rangle_C = \langle x(t) \rangle^2 + \frac{k_B T}{m\omega^2} \left\{ 1 - e^{-\beta t} \left(\frac{\beta^2}{2\omega_1^2} \sin^2 \omega_1 t + \frac{\beta}{2\omega_1} \sin 2\omega_1 t + 1 \right) \right\}, \quad (3.26)$$

donde el valor medio $\langle x(t) \rangle$ está dado por la expresión (3.25). En el capítulo 4, sección (4.3), las expresiones (3.24), obtenida con el método de Langevin y (3.26), solución exacta, para el caso periódico se grafican y comparan junto a la simulación numérica de (3.7) con las condiciones del caso periódico.

Esta sección se puede concluir afirmando que es posible aplicar el método de Langevin para resolver el problema de una partícula Browniana en un oscilador armónico. En el siguiente capítulo se analizará qué tan cercanas están una solución de otra y qué sucede en el límite de tiempos largos. A continuación se analizará el caso de una partícula browniana en un campo magnético.

3.3. PB en un campo magnético

En esta sección se muestra el análisis del problema del Movimiento browniano en un campo magnético aplicando el método original de Langevin. Se considera una partícula browniana de masa m y carga q inmersa en un fluido de temperatura T , el cuál se encuentra bajo la acción de una fuerza magnética adicional, dada por $F = \frac{q}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B}$, donde, c , la velocidad de la luz y el cociente $\frac{B}{c}$ se encuentran dados en unidades Gaussianas. De esta manera la ecuación de

Langevin queda de la siguiente forma:

$$m \frac{d^2 \chi}{dt^2} = -\alpha \frac{d\chi}{dt} + \frac{q}{c} v \times B + \xi(t) \quad (3.27)$$

Debido a que el campo magnético solo apunta en el sentido del eje z , la ecuación de Langevin asociada con la dinámica de la partícula puede ser escrita en términos de sus componentes, de la siguiente manera:

$$\ddot{x} = -\gamma \dot{x} + \Omega \dot{y} + \frac{1}{m} \xi_x(t), \quad (3.28)$$

$$\ddot{y} = -\gamma \dot{y} - \Omega \dot{x} + \frac{1}{m} \xi_y(t), \quad (3.29)$$

$$\ddot{z} = -\gamma \dot{z} + \frac{1}{m} \xi_z(t), \quad (3.30)$$

donde $\gamma = \alpha/m$, $\Omega = qB/mc$ es la frecuencia del ciclotrón. Se tiene que $\langle \xi_i(t) \rangle = 0$, así, cada ecuación de Langevin coincide con su ecuación determinista correspondiente. Lo cual físicamente significa que en cualquier tiempo el número de colisiones que la partícula puede experimentar en una dirección debe ser la misma en la dirección opuesta, y así el promedio de la fuerza fluctuante debe ser igual a cero.

Como se puede observar, la ecuación (3.30) es independiente del campo magnético pero también independiente de la dinámica que realiza la partícula en el plano $x - y$. De esta manera el movimiento browniano en el eje z es el mismo que describe una partícula libre y el DCP puede ser calculado exactamente como lo hizo Langevin.

A diferencia del eje z , el plano $x - y$ presenta un acoplamiento de las ecuaciones de Langevin (3.28) y (3.29), por lo cual no se puede calcular directamente el DCP tal como lo hizo Langevin para la partícula libre, sin embargo, sí es posible utilizar su planteamiento [13] como se muestra a continuación.

Para llegar a la solución se eligen las siguientes funciones complejas estocásticas $\rho = x + iy$ y $\rho^* = x - iy$, al sustituirlas en (3.28) y (3.29), se obtienen las siguientes expresiones:

$$\frac{d^2 \rho}{dt^2} = -\beta \frac{d\rho}{dt} + \eta(t) \quad (3.31)$$

$$\frac{d^2 \rho^*}{dt^2} = -\beta^* \frac{d\rho^*}{dt} + \eta^*(t), \quad (3.32)$$

donde $\beta = \gamma + i\Omega$, $\beta^* = \gamma - i\Omega$, $\eta(t) = \eta_x(t) + i\eta_y(t)$, $\eta^*(t) = \eta_x(t) - i\eta_y(t)$, con $\eta_x(t) = \frac{1}{m}\xi_x(t)$, y $\eta_y(t) = \frac{1}{m}\xi_y(t)$ (Aquí el super-índice * se entiende como un complejo conjugado). El siguiente paso es multiplicar las Ecs. (3.31) y (3.32) por $\beta^* \rho^*$ y $\beta \rho$ respectivamente, y combinando ambas expresiones se obtiene

$$\begin{aligned} & \gamma \left(\rho \frac{d^2 \rho^*}{dt^2} + \rho^* \frac{d^2 \rho}{dt^2} \right) + i\Omega \left(\rho \frac{d^2 \rho^*}{dt^2} - \rho^* \frac{d^2 \rho}{dt^2} \right) \\ &= \beta_e \frac{d\rho\rho^*}{dt} + \beta^* \rho^* \eta(t) + \beta \rho \eta^*(t), \end{aligned} \quad (3.33)$$

donde $\beta_e = \gamma^2 + \Omega^2 = \gamma^2(1 + C^2)$ y $C = \Omega/\gamma$. Después, tomando en cuenta el módulo cuadrado $|\rho|^2 = \rho\rho^* = x^2 + y^2$, se puede comprobar la identidad

$$\rho \frac{d^2 \rho^*}{dt^2} + \rho^* \frac{d^2 \rho}{dt^2} = \frac{d^2 |\rho|^2}{dt^2} - 2v^2, \quad (3.34)$$

donde $v^2 = v_x^2 + v_y^2$. Sustituyendo la Ec. (3.34) en la Ec. (3.33) se obtiene

$$\begin{aligned} & i\Omega \left(\rho \frac{d^2 \rho^*}{dt^2} - \rho^* \frac{d^2 \rho}{dt^2} \right) + \gamma \frac{d^2 |\rho|^2}{dt^2} \\ &= \beta_e \frac{d|\rho|^2}{dt} + 2\gamma v^2 + \beta^* \rho^* \eta(t) + \beta \rho \eta^*(t). \end{aligned} \quad (3.35)$$

El siguiente paso es tomar el promedio del ensemble para el cual

$$\left\langle i\Omega \left(\rho \frac{d^2 \rho^*}{dt^2} - \rho^* \frac{d^2 \rho}{dt^2} \right) \right\rangle + \gamma \frac{d^2 \langle |\rho|^2 \rangle}{dt^2}$$

$$= \beta_e \frac{d\langle |\rho|^2 \rangle}{dt} + 2\gamma \langle v^2 \rangle + \langle \beta^* \rho^* \eta(t) + \beta \rho \eta^*(t) \rangle, \quad (3.36)$$

donde

$$\begin{aligned} \langle \beta^* \rho^* \eta(t) + \beta \rho \eta^*(t) \rangle &= \gamma [\langle x \eta_x \rangle + \langle y \eta_y \rangle] \\ + \Omega [\langle x \eta_y \rangle - \langle y \eta_x \rangle] &= \gamma \langle \mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\eta} \rangle + \Omega \langle [\mathbf{x} \times \boldsymbol{\eta}]_z \rangle, \end{aligned} \quad (3.37)$$

tal que $\mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\eta}$ es el producto escalar y $[\mathbf{x} \times \boldsymbol{\eta}]_z$ la componente z del producto cruz $\mathbf{x} \times \boldsymbol{\eta}$, siendo así $\mathbf{x} = (x, y)$ y $\boldsymbol{\eta} = (\eta_x, \eta_y)$. Ahora se toman las hipótesis propuestas por Langevin, esto es, la trayectoria media $\langle \mathbf{x} \rangle$ debe ser independiente del ruido $\boldsymbol{\eta}(t)$, así que, $\langle \mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\eta} \rangle = 0$ y $\langle [\mathbf{x} \times \boldsymbol{\eta}]_z \rangle = 0$, y por lo tanto $\langle \beta^* \rho^* \eta(t) + \beta \rho \eta^*(t) \rangle = 0$. También en el equilibrio térmico, el promedio de la energía cinética, en el caso de dos dimensiones está dado por $(1/2)m\langle v^2 \rangle = k_B T$. Bajo estas condiciones, la Ec. (3.36) se reduce a

$$\begin{aligned} &\left\langle i\Omega \left(\rho \frac{d^2 \rho^*}{dt^2} - \rho^* \frac{d^2 \rho}{dt^2} \right) \right\rangle + \gamma \frac{d^2 \langle |\rho|^2 \rangle}{dt^2} \\ &= \beta_e \frac{d\langle |\rho|^2 \rangle}{dt} + 4 \frac{\gamma k_B T}{m}. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Por otro lado, se puede comprobar, después de un poco de álgebra, que

$$\left\langle i\Omega \left(\rho \frac{d^2 \rho^*}{dt^2} - \rho^* \frac{d^2 \rho}{dt^2} \right) \right\rangle = 2\Omega \frac{d}{dt} \langle xv_y - yv_x \rangle. \quad (3.39)$$

Como se puede ver, la expresión $xv_y - yv_x$ está relacionada con la componente z del momento magnético definido por $\boldsymbol{\mu} = \frac{q}{2c} \mathbf{r} \times \mathbf{v}$, es decir, $\frac{2c}{q} \mu_z = xv_y - yv_x$, con $\mathbf{r} = (x, y, z)$ y $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$. Ahora, de acuerdo al teorema de Bohr-van Leeuwen, ver apéndice(A), en el equilibrio térmico el promedio del ensemble del momento magnético $\langle \mu_z \rangle_{eq} = 0$. En el equilibrio térmico se tiene que

$$2\Omega \frac{d}{dt} \langle xv_y - yv_x \rangle|_{eq} = 0, \quad \Rightarrow \langle xv_y - yv_x \rangle_{eq} = \text{cte}. \quad (3.40)$$

Si se admite la validez del teorema de Bohr-van Leewen, entonces $\langle xv_y - yv_x \rangle_{eq} = \frac{2c}{q} \langle \mu_z \rangle_{eq} = 0$, y así

$$\left\langle i\Omega \left(\rho \frac{d^2 \rho^*}{dt^2} - \rho^* \frac{d^2 \rho}{dt^2} \right) \right\rangle = 0. \quad (3.41)$$

Por lo tanto la Ec. (3.38) se reduce a la ecuación determinista

$$\frac{d^2 \langle |\rho|^2 \rangle}{dt^2} = \gamma_e \frac{d \langle |\rho|^2 \rangle}{dt} + 4 \frac{k_B T}{m}, \quad (3.42)$$

donde ahora $\gamma_e = \gamma(1 + C^2)$. Una primera integración lleva a

$$\frac{d \langle |\rho|^2 \rangle}{dt} = 4 \frac{k_B T}{m \gamma_e} + K_1 e^{-t/\tau_r}, \quad (3.43)$$

siendo $K_1 = 4 \frac{K_B T}{m \gamma_e}$ la constante de integración y $\tau_r = 1/\gamma_e$ el tiempo de relajación.

Después de una segunda integración obtenemos que

$$\langle |\rho|^2 \rangle - \langle |\rho(0)|^2 \rangle = 4 \frac{K_B T}{m \gamma_e} t - 4 \frac{K_B T}{m \gamma_e^2} (1 - e^{-t/\tau_r}) \quad (3.44)$$

Para el límite de tiempos largos, tal que, $t \gg \tau_r$ y después de la segunda integración se obtiene el DCP

$$\begin{aligned} \langle |\rho(t)|^2 \rangle - \langle |\rho(0)|^2 \rangle &= \langle x(t)^2 \rangle - \langle x^2(0) \rangle \\ + \langle y(t)^2 \rangle - \langle y^2(0) \rangle &= 4 \frac{k_B T}{m \gamma_e} t = 4D_e t, \end{aligned} \quad (3.45)$$

donde $D_e = k_B T / m \gamma_e = D / (1 + C^2)$, con $D = k_B T / \alpha$ el coeficiente de difusión de Einstein.

El resultado (3.45) sugiere que $\langle x^2(t) \rangle - \langle x^2(0) \rangle = \langle y^2(t) \rangle - \langle y^2(0) \rangle = 2D_e t$. Para verificar que este es el caso, se puede comprobar que

$$\langle x^2 \rangle - \langle y^2 \rangle = \frac{1}{2} [\langle \rho^2 \rangle + \langle \rho^{*2} \rangle] \quad (3.46)$$

Se puede calcular la solución para $\langle \rho^2 \rangle$ y $\langle \rho^{*2} \rangle$ usando de nuevo las ecuaciones (3.31) y (3.32).

En este caso se puede mostrar que

$$\frac{d^2\langle\rho^2\rangle}{dt^2} = -\beta \frac{d\langle\rho^2\rangle}{dt} + 2\langle\dot{\rho}^2\rangle + \langle\rho\eta(t)\rangle. \quad (3.47)$$

$$\frac{d^2\langle\rho^{*2}\rangle}{dt^2} = -\beta^* \frac{d\langle\rho^{*2}\rangle}{dt} + 2\langle\dot{\rho}^{*2}\rangle + \langle\rho^*\eta^*(t)\rangle, \quad (3.48)$$

donde

$$\langle\dot{\rho}^2\rangle = \langle v_x^2 - v_y^2 \rangle + 2i\langle v_x v_y \rangle, \quad (3.49)$$

$$\langle\dot{\rho}^{*2}\rangle = \langle v_x^2 - v_y^2 \rangle - 2i\langle v_x v_y \rangle \quad (3.50)$$

$$\langle\rho\eta(t)\rangle = \langle x\eta_x(t) - y\eta_y(t) \rangle + i\langle x\eta_y(t) + y\eta_x(t) \rangle, \quad (3.51)$$

$$\langle\rho^*\eta^*(t)\rangle = \langle x\eta_x(t) - y\eta_y(t) \rangle - i\langle x\eta_y(t) + y\eta_x(t) \rangle. \quad (3.52)$$

Si se considera nuevamente que, la trayectoria media es independiente del ruido, entonces $\langle\rho\eta(t)\rangle = 0$ y $\langle\rho^*\eta^*(t)\rangle = 0$. También en el equilibrio térmico la equipartición de la energía es válida y así $\langle v_x^2 \rangle = \langle v_y^2 \rangle = k_B T/m$. Debido a este hecho ahora se tiene la ecuación determinista

$$\frac{d^2\langle\rho^2\rangle}{dt^2} = -\beta \frac{d\langle\rho^2\rangle}{dt} + 2\langle\dot{\rho}^2\rangle_{eq}. \quad (3.53)$$

$$\frac{d^2\langle\rho^{*2}\rangle}{dt^2} = -\beta^* \frac{d\langle\rho^{*2}\rangle}{dt} + 2\langle\dot{\rho}^{*2}\rangle_{eq}. \quad (3.54)$$

Después de una primera integración de estas expresiones se obtiene

$$\frac{d}{dt}\langle\rho^2\rangle = 2\frac{\langle\dot{\rho}^2\rangle_{eq}}{\beta} + K_2 e^{-\beta t}, \quad (3.55)$$

$$\frac{d}{dt}\langle\rho^{*2}\rangle = 2\frac{\langle\dot{\rho}^{*2}\rangle_{eq}}{\beta^*} + K_3 e^{-\beta^* t}, \quad (3.56)$$

siendo K_2 y K_3 constantes de integración y $e^{-\beta t} = e^{-\gamma t}[\cos \Omega t - i \sin \Omega t]$ y $e^{-\beta^* t} = e^{-\gamma t}[\cos \Omega t +$

i sin Ωt]. En el límite de tiempos largos y después de una segunda integración las soluciones son:

$$\langle \rho^2(t) \rangle - \langle \rho^2(0) \rangle = 2 \frac{\langle \dot{\rho}^2 \rangle_{eq}}{\beta} t, \quad (3.57)$$

$$\langle \rho^{*2}(t) \rangle - \langle \rho^{*2}(0) \rangle = 2 \frac{\langle \dot{\rho}^{*2} \rangle_{eq}}{\beta^*} t, \quad (3.58)$$

y de acuerdo con la Ec. (3.46) se obtiene

$$\begin{aligned} & \langle x^2(t) \rangle - \langle x^2(0) \rangle - [\langle y^2(t) \rangle - \langle y^2(0) \rangle] \\ &= \frac{2t}{\beta_e} \{ \gamma [\langle v_x^2 \rangle_{eq} - \langle v_y^2 \rangle_{eq}] - 2\Omega \langle v_x v_y \rangle_{eq} \}. \end{aligned} \quad (3.59)$$

De la distribución de equilibrio de Maxwell se verifica que $\langle v_x^2 \rangle_{eq} = \langle v_y^2 \rangle_{eq} = k_B T/m$ y también satisface $\langle v_x v_y \rangle_{eq} = 0$. Finalmente, se muestra que $\langle x^2(t) \rangle - \langle x^2(0) \rangle = \langle y^2(t) \rangle - \langle y^2(0) \rangle$, y por lo tanto de la Ec.(3.45) se concluye que

$$\langle x^2(t) \rangle - \langle x^2(0) \rangle = \langle y^2(t) \rangle - \langle y^2(0) \rangle = 2D_e t, \quad (3.60)$$

el cual es el resultado esperado [23, 24, 26, 27, 28, 29], es decir, es el mismo que se obtiene mediante los métodos estocásticos estándar que requieren usar las propiedades estadísticas del ruido. En el capítulo 4, sección (4.4), se presenta la gráfica del resultado y se compara con la simulación numérica.

Capítulo 4

Simulación numérica para el Movimiento Browniano

En el campo de la investigación, las técnicas de simulación son ampliamente conocidas y aplicadas, hoy en día, constituyen una herramienta imprescindible para la predicción en las ciencias naturales y sociales. Las simulaciones computacionales nos permiten “experimentar” con situaciones no accesibles o imposibles de crear en el laboratorio y de igual forma comparar resultados teóricos obtenidos aplicando teorías todavía en prueba. La simulación también puede ser utilizada como herramienta de enseñanza, ya que permite visualizar lo que sucede con modelos o resultados aprendidos en la teoría.

Dentro de las ecuaciones diferenciales que modelan la dinámica de sistemas físicos, las ecuaciones diferenciales estocásticas (EDE) son un caso especial y son necesarias cuando hay un elemento de aleatoriedad en su evolución. En los últimos años la aplicación de la EDE se ha extendido más allá de la física.

La teoría de las ecuaciones diferenciales estocásticas fue desarrollada en los años 40 por los matemáticos (Itô, Gihman, Kolmogorov, Levy, Wiener, entre otros) como una herramienta para la construcción explícita de las trayectorias de procesos de difusión. Sin embargo, en física las ecuaciones diferenciales estocásticas surgen de manera natural en la descripción de sistemas que están afectados por ruido. De hecho, como ya se ha mencionado, la ecuación de Langevin

propuesta en 1908 se considera el primer modelo de este tipo, al incluir una fuerza fluctuante dentro de las fuerzas que actúan sobre una partícula browniana.

Como se enunció en los capítulos anteriores, la ecuación de Langevin se plantea desde la Segunda Ley de movimiento de Newton, que relaciona la fuerza neta con la aceleración, por lo que se obtiene una EDE de segundo grado.

Por lo que se ha explicado en esta introducción, la simulación numérica de EDE es muy importante, debido a esto, además de la investigación realizada desde la parte teórica presentada en el capítulo 3, se ha considerado indispensable combinarla con la simulación numérica. Así, en este capítulo se presentan las simulaciones numéricas de los modelos físicos presentados en el capítulo 3, a fin de comparar los resultados teóricos obtenidos con la metodología de Langevin y los resultados exactos, y ambos con los resultados numéricos.

Este capítulo está organizado de la siguiente forma, en la primera sección se presenta un resumen del método numérico utilizado para realizar las simulaciones. En la siguiente sección se muestra la simulación numérica para una partícula libre y los resultados se comparan con los presentados recientemente por unos autores que realizaron el experimento en el laboratorio, usando partículas de distintos diámetros. Las últimas dos secciones están dedicadas al Oscilador Armónico Browniano y a la PB cargada en un campo magnético constante. Cabe mencionar que la simulación numérica del Oscilador Armónico Browniano es una aportación de este trabajo de tesis a una publicación que ya fue aceptada y actualmente se encuentra en prensa [14].

4.1. Método de Euler y Heun

Cuando se plantea escribir la ecuación de Langevin para una PB sujeta a ciertas fuerzas se obtiene una EDE que puede escribirse de la siguiente forma

$$\ddot{x} = f(x) - \eta s^2(x)\dot{x} + \epsilon s(x)\xi(t) \quad (4.1)$$

donde $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \delta(t-t')$ y el parámetro de amortiguamiento se denota por η . Los brackets

$\langle \rangle$ denotan el promedio sobre las realizaciones. La ecuación diferencial de segundo orden estocástica (EDE)(4.1) describe la posición de una partícula sujeta a una fuerza determinista $f(x)$ y una fuerza aleatoria $\xi(t)$. La fuerza determinista está relacionada a la función potencial $V(x)$ via $f(x) = -V'(x)$. La amplitud de la fuerza aleatoria, ϵ , está relacionada a la temperatura T y el coeficiente de amortiguamiento η por la relación de fluctuación-disipación $\epsilon^2 = 2\eta kT$. Es posible escribir a (4.1) como un par de ecuaciones de primer orden para \mathbf{X}_t y \mathbf{V}_t , variables de la posición y velocidad:

$$d\mathbf{X}_t = \mathbf{V}_t dt, \quad (4.2)$$

$$d\mathbf{V}_t = -\eta s^2(\mathbf{X}_t)\mathbf{V}_t dt + f(\mathbf{X}_t)dt + \epsilon s(\mathbf{X}_t)d\mathbf{W}_t \quad (4.3)$$

donde \mathbf{X}_t es un proceso de Wiener que satisface $\langle \mathbf{W}_t \mathbf{W}_s \rangle = \min(t, s)$. Si $s(x)$ no es una constante, la amplitud del ruido es una función de la posición y se dice comúnmente que la ecuación tiene un ruido multiplicativo.

Los métodos de Euler y Heun tratan simplemente a (4.3) y (4.2) como un par de EDEs. Es posible mostrar que esta descripción se comporta razonablemente bien en valores intermedios de amortiguamiento y falla para un amortiguamiento grande [30].

Método de Euler.

Según el método de Euler, las variables de la posición y la velocidad se actualizan de la siguiente manera:

$$X_{n+1} = X_n + V_n \Delta t, \quad (4.4)$$

$$V_{n+1} = V_n - \eta V_n \Delta t + f(X_n) \Delta t + \epsilon \Delta W_n. \quad (4.5)$$

Método de Heun

Bajo el método de Heun, los valores intermedios son obtenidos vía el método de Euler:

$$\hat{X} = X_n + V_n \Delta t, \quad (4.6)$$

$$\hat{V} = V_n - \eta V_n \Delta t + f(X_n) \Delta t + \epsilon \Delta W_n \quad (4.7)$$

La actualización ahora es la siguiente

$$X_{n+1} = X_n + \frac{1}{2}(V_n + \hat{V}) \Delta t \quad (4.8)$$

$$V_{n+1} = V_n - \frac{1}{2} \eta (V_n + \hat{V}) \Delta t + \frac{1}{2} (f(X_n) + f(\hat{X})) \Delta t + \epsilon \Delta W_n \quad (4.9)$$

Casi todas las simulaciones numéricas presentadas en este capítulo son realizadas con el método de Heun que es casi tan simple como el de Euler pero es más preciso (tiene mejor convergencia en el step temporal), suficiente para los casos que se abordan en esta tesis. Sólo en dos casos se utiliza el método de Euler.

4.2. Partícula browniana con diferentes diámetros

Tras haber observado los experimentos realizados en [20], se ha propuesto tratar de llegar a los mismos resultados que los autores reportan de manera experimental pero ahora se obtendrán de manera numérica, partiendo de la ecuación diferencial estocástica

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -\alpha \frac{dx}{dt} + \xi(t)$$

para la PB, la simulación se realizará usando el método de Euler, ya que en este caso se tomará el régimen sobreamortiguado que basta para reproducir los experimentos numéricamente. Utilizando simplemente la posición; la ecuación para generar las siguientes posiciones dada una inicial queda de la siguiente forma

$$X_{n+1} = X_n + \sqrt{\frac{2k_B T \Delta t}{3\pi\eta d}} \xi(t). \quad (4.10)$$

donde $\xi(t)$ es el ruido con una distribución gaussiana con media cero y varianza 1. k_B la constante de Boltzman, T la temperatura del fluido, η la viscosidad del agua y d el diámetro de la partícula. Ahora, para realizar la simulación se ha utilizado el lenguaje de programación "Phyton", donde se han realizado un total de 10000 iteraciones para una partícula de masa fija m . El código consiste en que a partir de la posición inicial de la partícula se genere el siguiente valor de la posición utilizando (4.10), como depende del generado anteriormente, se itera 50 veces con un intervalo de tiempo de 0,1 segundos para cada paso de la trayectoria, y de esta manera, se ha generado la trayectoria de una sola partícula browniana. Como siguiente paso, se deberán generar otras 10000 trayectorias siguiendo el mismo procedimiento mencionado anteriormente. Todos los datos de cada trayectoria son almacenados para después poder obtener un promedio de todas las trayectorias, donde se toman a un tiempo dado todas las posiciones que tomó la partícula, se elevan al cuadrado y se promedia obteniendo una posición cuadrática fija para ese tiempo dado, de igual manera para los siguientes 50 pasos, y de esta manera se obtienen todas las posiciones cuadráticas de la partícula en promedio, generando una sola recta. Los valores utilizados fueron $k_B = 1,38e - 23$, $T = 293$, $\eta = 1,02e - 3$. Como el objetivo de esta sección es obtener estas simulaciones para tres partículas con diferentes diámetros, se realiza el mismo procedimiento, pero ahora variando el diámetro de la partícula, donde se utilizó $d_1 = 0,5$ micras, $d_2 = 1,09$ micra y $d_3 = 2,06$ micras, que son los diámetros de dichas partículas. El último paso de la simulación es crear una gráfica (ver fig 4.1) donde se muestran los valores de los desplazamientos cuadráticos promedio de estas 3 partículas, y así poder obtener un ajuste a su pendiente desde el código.

Se obtiene un ajuste a una recta y al comparar con la ec. (3.6) se puede obtener el coeficiente de difusión D para estas partículas,

- Para la partícula de 0,5 micras, se obtiene $D_1 = 16,4 \times 10^{-3} m^2/s$
- Para la partícula de 1,09 micras, se obtiene $D_2 = 7,73 \times 10^{-3} m^2/s$

De esta manera, se pueden comparar los resultados experimentales contra los obtenidos numéricamente, notando que el error crece mientras el diámetro de la partícula disminuye, esto debido a que la partícula más pequeña tiende a ser un poco más fácil de "mover" que las partículas más grandes.

4.3. Movimiento browniano en un Oscilador armónico

La modelación de una partícula browniana en un oscilador armónico, parte de la ecuación de Langevin, que es semejante a la de una partícula libre, pero se agrega la fuerza de un oscilador, por lo tanto la ecuación resultante queda como

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \beta \frac{dx}{dt} + \omega^2 x = \frac{1}{m} \xi(t), \quad (4.11)$$

donde $\omega^2 = k/m$ es la frecuencia característica del oscilador armónico y $\beta = \frac{\alpha}{m}$. Una ecuación diferencial estocástica de segundo orden. Para realizar la simulación, se utiliza el método de Heun ya descrito anteriormente. Las variables auxiliares quedan de la siguiente manera:

$$\hat{V} = V_n - \beta V_n \Delta t - \omega^2 X_n \Delta t + \frac{\sqrt{2k_B T \eta}}{m} \Delta W_n \quad (4.12)$$

$$\hat{X} = X_n + V_n \Delta t \quad (4.13)$$

Y para las ecuaciones de la velocidad y la posición, se obtiene

$$V_{n+1} = V_n - \frac{1}{2} \beta (V_n + \hat{V}) \Delta t + \frac{1}{2} (-\omega^2 X_n - \omega^2 \hat{X}) \Delta t + \frac{\sqrt{2k_B T \eta}}{m} \Delta W_n \quad (4.14)$$

$$X_{n+1} = X_n + \frac{1}{2} (V_n + \hat{V}) \Delta t \quad (4.15)$$

Para obtener el desplazamiento cuadrático promedio, que es el objetivo que se busca con la simulación, se parte la posición en el valor 0 y para la velocidad le damos el valor inicial de 1. Después mediante la realización de dos ciclos donde uno de ellos va de 0 a 300 que será el número de pasos que recorre la partícula en tamaño de paso de 0,05 s, y otro ciclo que parte

Por lo cual se realizarán 3 modelaciones para este caso, para el caso de la simulación de la ecuación (4.19), se utiliza el mismo algoritmo implementado en la sección (4.2), pero esta vez el radio de la partícula es fija; observamos que la ecuación (4.17) y (4.18) están acopladas, por lo cual su simulación es dependiente una de otra, y por lo tanto deben estar incluidas en el mismo código simultáneamente. En este caso obtenemos las siguientes ecuaciones para proceder la simulación por el método de Euler

$$V_{xn+1} = V_{xn} - \gamma V_{xn} \Delta t + \Omega V_{yn} \Delta t + \epsilon \Delta W_x \quad (4.20)$$

$$V_{yn+1} = V_{yn} - \gamma V_{yn} \Delta t - \Omega V_{xn} \Delta t + \epsilon \Delta W_y \quad (4.21)$$

$$X_{n+1} = X_n + V_{nx} \Delta t \quad (4.22)$$

$$Y_{n+1} = Y_n + V_{ny} \Delta t \quad (4.23)$$

Que son las ecuaciones que se utilizan para realizar la simulación, en este caso V_{xn+1} y V_{yn+1} hacen referencia a las velocidades en las direcciones x y y respectivamente, V_{xn} y V_{yn} hacen referencia a las velocidades en las direcciones x y y un instante antes de las velocidades V_{xn+1} y V_{yn+1} . Por otra parte X_{n+1} y Y_{n+1} indican la siguiente posición en un instante después de las posiciones X_n y Y_n , $\Omega = \frac{qB}{mc}$ es la frecuencia del ciclotrón, $\gamma = \frac{\alpha}{m}$, ΔW_x y ΔW_y los ruidos en cada una de las direcciones x y y respectivamente. La manera de llevar a cabo la simulación es la misma dinámica que las demás simulaciones, pero a diferencia de las anteriores dentro del ciclo que genera las posiciones y velocidades para una sola dirección, en éste se realizan ambas direcciones al mismo momento debido al acoplamiento, se generan dos diferentes ruidos para hacer referencia a ambas direcciones, se inicializan las posiciones y velocidades en cero, y de esta manera obtener los siguientes valores en el instante posterior. Se generan alrededor de 15,000 trayectorias las cuales guardan sus posiciones y velocidades a un mismo tiempo en una matriz, para después al momento de tomar el promedio se haga directamente sobre todas las posiciones al cuadrado de un mismo tiempo dado, y de esta manera obtener una posición promedio para cada instante, luego se suman los desplazamientos cuadráticos promedio de la posición en x y y y así obtener el DCP como suma de estas dos obteniendo un equivalente a

Capítulo 5

Conclusiones

En este trabajo de tesis se ha presentado un análisis teórico y los resultados de las simulaciones numéricas para partículas brownianas en dos situaciones físicas distintas. Para el análisis teórico se ha utilizado el método original de Langevin. Los casos analizados fueron: PB bajo la influencia de una fuerza de potencial tipo oscilador armónico y el otro una PB bajo la acción de un campo magnético, en ambos casos se encuentran expresiones para el desplazamiento cuadrático promedio similares a las soluciones exactas encontradas mediante los métodos estándar de los procesos estocásticos, es decir métodos usuales que utilizan las propiedades estadísticas del ruido. Por lo que se puede concluir que, aunque el Método de Langevin no proporciona las soluciones completas para los casos analizados, sí que es consistente en el límite de tiempos mucho mayores que el tiempo de relajación de la PB. Luego entonces es un método generalmente más simple.

Aunque hay muchos trabajos relacionados con el movimiento browniano, curiosamente el cálculo del DCP usando la metodología original de Langevin no había sido implementado en los dos casos estudiados en esta tesis. Esto debido a que este método no proporciona la descripción completa para el DCP, sino solo en el límite de tiempos mucho mayores que el tiempo de relajación. Para calcular los DCP en los dos casos estudiados se ha requerido de algunos cálculos indirectos como es el caso de las varianzas para el oscilador armónico y de una hipótesis adicional, es decir, la validez del teorema de Bohr-Van Leuven en el equilibrio térmico, en el caso

de la PB en un campo magnético.

Finalmente, recientemente se ha encontrado sorprendentemente que el método original de Langevin funciona de manera exacta si se aplica en la misma ecuación pero para la velocidad como variable dinámica. Esta ecuación de Langevin es también conocida como el proceso de Ornstein-Uhlenbeck [12]. Es decir, el resultado para la velocidad cuadrática promedio es exactamente la misma que se si se utiliza la formulación estándar convencional.

Appendix A

Apéndice: Teorema de Bohr-Van Leeuwen

Considere un sistema clásico de N partículas cargadas cada una con carga e (para electrones $e = -|e|$), descrito por sus $3N$ coordenadas, q_i y $3N$ momentos, p_i [31]. En unidades cgs, una carga crea una densidad de corriente $\mathbf{j} = e\mathbf{v}$, y un campo magnético dado por

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{1}{2c} \mathbf{r} \times \mathbf{j} = \frac{e}{2c} \mathbf{r} \times \mathbf{v}. \quad (\text{A.1})$$

Se puede observar que $\boldsymbol{\mu}$ es una función lineal de la velocidad para cada electrón. Así, cualquiera que sea el patrón de movimiento de todas las partículas cargadas, el momento magnético total es también una función lineal de todas las velocidades del electrón. Dado a este hecho, se presta atención a la componente z del momento magnético total, que puede ser escrito como

$$\mu_z = \sum_{i=1}^{3N} a_i^z(q_1, \dots, q_{3N}) \dot{q}_i, \quad (\text{A.2})$$

Donde los coeficientes a_i^z son funciones solo de todas las coordenadas q_i . De la dinámica Hamiltoniana se tiene $\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$, $\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$, siendo H el Hamiltoniano dado por $H = \sum_{i=1}^{3N} \frac{1}{2m} (\mathbf{p}_i - \frac{e}{c} \mathbf{A}_i)^2 + eV$, donde $\mathbf{A} \equiv \mathbf{A}(q_1, \dots, q_{3N})$ es el vector potencial del campo magnético y $eV \equiv eV(q_1, \dots, q_{3N})$ la energía potencial. Así que $\mu_z = \sum_{i=1}^{3N} a_i^z(q_1, \dots, q_{3N}) \frac{\partial H}{\partial p_i}$. De la mecánica de

equilibrio estadística, el valor promedio del momento magnético se lee

$$\langle \mu_z \rangle = \frac{\int \mu_z e^{-\beta H} dq_1 \dots dq_{3N} dp_1 \dots dp_{3N}}{\int e^{-\beta H} dq_1 \dots dq_{3N} dp_1 \dots dp_{3N}}, \quad (\text{A.3})$$

donde $\beta = 1/k_B T$. Para simplificar los cálculos se elige $N = 1$, y así $H = \sum_{i=1}^3 \frac{1}{2m} [p_i - (e/c)A_i]^2 + eV$. En este caso, $\frac{\partial H}{\partial p_i} = \sum_{i=1}^3 \frac{1}{m} [p_i - \frac{e}{c}A_i]$ y el numerador está definido por

$$\begin{aligned} I &= \int \mu_z e^{-\beta H} \Pi_i dq_i \Pi_i dp_i = \sum_{i=1}^3 \int \frac{a_i^z}{m} \left(p_i - \frac{e}{c}A_i \right) \times \\ &\quad \exp \left[-\frac{\beta}{2m} \sum_{i=1}^3 \left(p_i - \frac{e}{c}A_i \right)^2 - \beta eV \right] \Pi_i dq_i \Pi_i dp_i. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Con un cambio de variable $u_i = p_i - (e/c)A_i$, se hacen las integrales respecto a p_i o du_i , tal que

$$\begin{aligned} I &= \sum_{i=1}^3 \int \frac{a_i^z}{m} e^{-\beta eV} \Pi_i dq_i \times \int_{-\infty}^{\infty} u_i e^{-\frac{\beta}{2m} \sum_{i=1}^3 u_i^2} \Pi_i du_i \\ &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Resultados similares ocurren para $N = 1, 2, \dots$, partículas y así $\langle \mu_z \rangle = 0$. Esto significa que, en el equilibrio térmico no hay momento magnético a cualquier vector potencial o cualquier campo magnético aplicado.

Bibliografía

- [1] Albert Einstein. Über die von der molekularkinetischen theorie der wärme geforderte bewegung von in ruhenden flüssigkei ten suspendierten teilchen. *Annalen der Physik*, 17(8):549–560, 1905.
- [2] P. Langevin. Sur la théorie du mouvement brownien. *C. R. Acad. Sci.*, 146:530–533, 1908.
- [3] Stéphan Fauve and F Heslot. Stochastic resonance in a bistable system. *Physics Letters A*, 97(1-2):5–7, 1983.
- [4] Luca Gammaitoni, Peter Hänggi, Peter Jung, and Fabio Marchesoni. Stochastic resonance. *Reviews of modern physics*, 70(1):223, 1998.
- [5] R Dean Astumian and Peter Hänggi. Brownian motors. *Physics today*, 55(11):33–39, 2002.
- [6] Peter Reimann and Peter Hänggi. Introduction to the physics of brownian motors. *Applied Physics A*, 75(2):169–178, 2002.
- [7] Peter Reimann. Brownian motors: noisy transport far from equilibrium. *Physics reports*, 361(2-4):57–265, 2002.
- [8] Ronald D Vale and Ronald A Milligan. The way things move: looking under the hood of molecular motor proteins. *Science*, 288(5463):88–95, 2000.
- [9] Jonathon Howard et al. *Mechanics of motor proteins and the cytoskeleton*. Sinauer associates Sunderland, MA, 2001.
- [10] Rainer Klages, Wolfram Just, and Christopher Jarzynski. *Nonequilibrium statistical physics of small systems*. Wiley Online Library, 2013.

- [11] K. Sekimoto. *Stochastic Energetics*. Springer, Berlin Heidelberg, 2010.
- [12] G. E. Uhlenbeck and L. S. Ornstein. On the theory of the brownian motion. *Phys. Rev.*, 36:823–841, Sep 1930.
- [13] N Lucero-Azuara, N Sánchez-Salas, and JI Jiménez-Aquino. Brownian motion across a magnetic field: Langevin approach revisited. *European Journal of Physics*, 41(3):035807, 2020.
- [14] O Contreras-Vergara, N Lucero-Azuara, N Sánchez-Salas, and JI Jiménez-Aquino. Harmonic oscillator brownian motion: Langevin approach revisited. En prensa en *Rev. Mex. de Física E*, 2020.
- [15] R. Brown. A brief account of microscopical observations made in the months of june, july, and august, 1827, on the particles contained in the pollen of plants; and on the general existence of active molecules in organic and inorganic bodies. *Philos. Mag.*, 4:161–173, 1828.
- [16] J. Perrin. Mouvement brownien et réalité moléculaire. *Ann. Chim. Phys.*, 18:5–114, 1909.
- [17] H. Risken. *The Fokker-Planck Equation*. Springer, Berlin Heidelberg, 1996.
- [18] D. S. Lemons and A. Gythiel. Paul Langevin’s 1908 paper “On the Theory of Brownian Motion” [“Sur la théorie du mouvement brownien,” *C. R. Acad. Sci. (Paris)* 146, 530-533 (1908)]. *American Journal of Physics*, 65(11):1079–1081, 1997.
- [19] Stephen G Brush. A history of random processes. *Archive for history of exact sciences*, 5(1):1–36, 1968.
- [20] Ronald Newburgh, Joseph Peidle, and Wolfgang Rueckner. Einstein, perrin, and the reality of atoms: 1905 revisited. *American journal of physics*, 74(6):478–481, 2006.
- [21] Nelson Wax. *Selected Papers on Noise and Stochastic Processes*. Dover Publications, 2004.
- [22] William T. Coffey and Kalmykov Kalmykov. *Langevin Equation, The: With Applications to Stochastic Problems in Physics, Chemistry and Electrical Engineering*. World Scientific Publishing Company, 2012.

- [23] JB Taylor. Diffusion of plasma across a magnetic field. *Physical Review Letters*, 6(6):262, 1961.
- [24] Behram Kurşunoğlu. Brownian motion in a magnetic field. *Annals of Physics*, 17(2):259–268, 1962.
- [25] S. Chandrasekhar. Stochastic problems in physics and astronomy. *Rev. Mod. Phys.*, 15:1–89, Jan 1943.
- [26] Leonardo Ferrari. Heavy ions in light gases in an electric field: Ii. time-dependent solutions of the fokker-planck equation both in the absence and in the presence of a magnetic field. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 163(2):596–614, 1990.
- [27] Radosław Czopnik and Piotr Garbaczewski. Brownian motion in a magnetic field. *Physical Review E*, 63(2):021105, 2001.
- [28] Tania P Simões and Roberto E Lagos. Kramers equation for a charged brownian particle: The exact solution. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 355(2-4):274–282, 2005.
- [29] JI Jiménez-Aquino and Mauricio Romero-Bastida. Brownian motion of a charged particle in a magnetic field. *Revista mexicana de física E*, 52(2):182–187, 2006.
- [30] Kevin Burrage, Ian Lenane, and Grant Lythe. Numerical methods for second-order stochastic differential equations. *SIAM journal on scientific computing*, 29(1):245–264, 2007.
- [31] Amikam Aharoni et al. *Introduction to the Theory of Ferromagnetism*, volume 109. Clarendon Press, 2000.