Motores Brownianos: Transporte, Caos y Sincronización

Fernando Ramírez Alatriste Universidad Nacional Autónoma de México

> Ciudad de México CopIt ArXives 2007

Cop
It ArXives Ciudad de México Copyright ©2007 por Fernando Alatriste

Publicado 2007 por CopIt ArXives

Todos los derechos de propiedad de esta publicación pertenece al autor quien, no obstante, concede su autorización al lector para copiar, imprimir y distribuir su trabajjo libremente, en partes o completo, con la única condición que (i) el nombre del autor y y el título original del trabajo sea citado en todo momento, (ii) que el texto no sea modificado o mezclado y (iii) el uso final de este contenido no debe ser comercial, el incumplimiento de estas condiciones será una violación a la ley.

Producido eléctronicamente usando sofware libre y en cumplimiento con un espíritu Open Acces para publicaciones académicas.

Resumen

El propósito del presente trabajo fue estudiar la sincronización de fase y la dinámica caótica en motores Brownianos también llamados "ratchets". Consideramos tres casos: una partícula sobreamortiguada, una partícula inercial y dos partículas sobreamortiguadas acopladas a través de un potencial biestable. Estas partículas están sujetas a una fuerza periódica, una fuerza constante y a la fuerza debida a un potencial periódico y asimétrico (llamado potencial ratchet). La fuerza constante es necesaria para obtener un rotor forzado en ausencia de la fuerza periódica. Este rotor tiene una frecuencia característica que puede ser enganchada con la frecuencia de la fuerza periódica. Introducimos una fase lineal a través de un conjunto de tiempos determinados por la ocurrencia de saltos entre pozos del potencial ratchet. Mostramos que la frecuencia promedio asociada a la fase lineal puede ser sincronizada con la frecuencia del forzamiento periódico. De esta forma, podemos formalmente caracterizar la sincronización a través de las lenguas de Arnold, las cuales representan regiones de sincronización en el espacio de parámetros del forzamiento. Discutimos en todos los casos las implicaciones de la sincronización en el transporte de ratchets.

Abstract

In this work we study phase synchronization and the chaotic dynamics in Brownian motors also called "ratchets". We consider three cases: one overdamped particle, one underdamped particle and two overdamped particles coupled through a bistable potential. These particles are subject to a periodic force, a constant force and a force due to a periodic and asymmetric potential called "ratchet potential". The constant force is necessary in order to tilt the ratchet and obtain a forced rotor in the absence of the periodic force. This forced rotor has a characteristic frequency that can be locked with the frequency of the external driving. We introduced a linear phase through a set of times basing on the occurrence of jumps between the wells of the ratchet potential. We show that the average frequency associated to the linear phase can be locked with the frequency of the external driving. In this way, we can properly characterize the phenomenon of synchronization through Arnold tongues, which represents regions of synchronization in the parameter space. We discuss the implications of the synchronization for the transport in ratchets.

A mi familia, con amor y gratitud

Índice general

1.	Intr	oducción	1
2.	Mov	vimiento Browniano	5
	2.1.	Comentarios históricos	5
	2.2.		6
	2.3.	Desplazamiento cuadrático medio	11
3.	Ecu	aciones de Langevin y Fokker-Planck	13
	3.1.	Solución estacionaria de la ecuación de Fokker Planck	15
	3.2.	Procesos de Wiener	16
	3.3.	Algoritmo para resolver ecuaciones diferenciales estocásticas .	20
4.	Mov	vimiento Browniano en potenciales periódicos	23
	4.1.	Normalización de las ecuaciones de Fokker Planck y de Lan-	
		gevin	24
	4.2.	Solución estacionaria	25
5.	Mot	tores Brownianos	29
	5.1.	Máquinas de movimiento perpetuo	29
	5.2.	Ratchet de Feynman	30
	5.3.	Modelo simplificado estocástico	32
		5.3.1. Solución estacionaria	35
	5.4.	Efecto ratchet	38
6.	Sino	cronización	41
	6.1.	Sincronización de un oscilador por una fuerza externa	48
		6.1.1. Dinámica de la fase	49
		6.1.2. Pequeñas perturbaciones e isócronas	50

		6.1.3. La ecuación para la dinámica de la fase 5	1
		6.1.4. Dinámica lenta de la fase 5	2
		6.1.5. Enganche de fase y región de sincronización $\dots 5$	3
	6.2.	Sincronización de frecuencia y fase en sistemas estocásticos 5	7
		6.2.1. Fase lineal interpolada ϕ^L	8
	6.3.	Fase discreta ϕ^D y fase de Hilbert ϕ^H 6	1
7.	Sinc	ronización del ratchet Sobreamortiguado 6	3
	7.1.	Definición de la fase	3
	7.2.	Ratchet sobreamortiguado 6	6
		7.2.1. Resultados numéricos 6	7
8.	Sinc	ronización del Ratchet inercial 7	9
	8.1.	Inversión de corriente y diagrama de bifurcación 8	2
	8.2.	Resultados numéricos	5
		8.2.1. Ratchet inclinado inercial como un rotor 8	5
		8.2.2. Sincronización del ratchet inclinado con inercia con una	
		fuerza externa periódica	7
9.	Sinc	ronización de dos motores Brownianos 9	9
	9.1.	El modelo del caminante	0
	9.2.	definición de las fases	2
	9.3.	Resultados numéricos	3
10	.Con	clusión 11	3

Capítulo 1

Introducción

La física estadística fuera del equilibrio ha mostrado avances sorprendentes en la última década. Estos avances han revelado fenómenos de suma importancia sobre el orden inducido por el ruido. Los cuales se deben principalmente al papel constructivo del ruido en sistemas no lineales. La resonancia estocástica [1, 2, 3, 4] y los motores Brownianos [5, 6, 7] son ejemplos claros de que el ruido induce orden. 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 directo (velocidad promedio diferente de cero).

El transporte directo inducido por el ruido térmico en sistemas espacialmente periódicos está descartado por la segunda ley de la termodinámica. Entonces, para generar transporte directo, el sistema debe ser llevado fuera del equilibrio térmico ya sea por una fuerza determinista o estocástica. El caso más interesante aparece cuando estas fuerzas son de promedio cero y con esto nos referimos a que el promedio temporal, espacial o de ensamble de las fuerzas asociadas es cero. Además de tener al sistema fuera del equilibrio térmico, se requiere que el sistema tenga una asimetría espacial.

Los motores Brownianos pueden ser modelados por una partícula Browniana sujeta a una fuerza determinista o estocástica externa dependiente del tiempo de promedio cero y a la fuerza debida a un potencial periódico y asimétrico llamado potencial ratchet.

Los avances en el área de investigación sobre motores Brownianos, también llamados ratchets" (o motores moleculares en el ámbito biológico), han sido motivados en parte, por el reto de explicar el transporte unidireccional

de proteínas en el interior de las células. En particular, la cinesina es uno de estos motores moleculares que han atraído especial interés debido a que los detalles de su dinámica ya han sido medidos [8, 9]. Otros avances que han impulsado el estudio de los motores Brownianos se deben a razones científicas y tecnológicas enfocadas al entendimiento de las técnicas de separación y bombeo inducidas por ruido [10].

Los motores Brownianos han sido utilizados en una gran variedad de áreas como: Uniones Josephson [11, 12, 13], ratchet cuánticos [14], reduciendo la densidad de vórtices en superconductores [15, 16], suspensiones coloidales de partículas ferromagnéticas [17], solo por mencionar algunas. Para una revisión extensa sobre los motores Brownianos consultar [7]. A pesar de que la mayoría de la literatura en este campo considera la presencia de ruido, ha habido trabajos que modelan las propiedades de transporte de ratchets deterministas [18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26], mostrando que existe una gran variedad de fenómenos no lineales relacionados.

Por otro lado, existen otros fenómenos relacionados con los sistemas no lineales como la sincronización. La sincronización en términos generales significa la correlación o la concordancia en el tiempo de dos procesos. Esta es muy común en sistemas complejos, no sólo en las ciencias físicas, sino también en las ciencias de la vida [12, 27, 28, 29].

La sincronización ha sido estudiada desde los primeros días de la física. Empezó desde el siglo XVII cuando Huygens encontró que dos péndulos débilmente acoplados (colgando del mismo soporte) se sincronizaban en fase . Actualmente las investigaciones en sincronización se han enfocado en sistemas caóticos y estocásticos, para una revisión ver [12, 28]. En el primer caso, la aparición de una dinámica sincronizada es en general no trivial. Un sistema caótico se caracteriza por que su evolución depende sensiblemente de las condiciones iniciales. Esto quiere decir que dos condiciones iniciales muy cercanas se separan exponencialmente con el tiempo. Por lo que un sistema caótico desafía intrínsecamente la definición de sincronización.

Recientemente han habido trabajos donde se estudia la sincronización en motores Brownianos, pero sólo abarcan la sincronización completa entre dos ratchets acoplados [30, 31, 32, 33], y con sincronización anticipada entre dos ratchets acoplados con un retraso temporal [34]. Sin embargo todavía queda por estudiar muchos aspectos interesantes, por lo que en este trabajo nos enfocaremos en la sincronización de frecuencias en ratchets.

El esquema del presente trabajo es el siguiente: en el capitulo 2 revisamos los conceptos básicos sobre le movimiento Browniano, que serán fundamenta-

les para la discusión de los siguientes capítulos. En el capítulo 3 revisamos de forma general la ecuación de Langevin, la cual describe la dinámica de una partícula Browniana sujeta a fuerzas externas. También revisamos en este mismo capítulo la ecuación de Fokker-Planck, la cual describe la evolución temporal de la densidad de probabilidad asociada a la ecuación de Langevin. En el capítulo 4 revisamos los resultados analíticos sobre el movimiento Browniano en potenciales periódicos. En el capítulo 5 revisamos el tema de los motores Brownianos y el efecto ratchet. En el capítulo 6 introducimos los conceptos básicos sobre sincronización y definimos la fase de un sistemas caótico o estocástico. En el capítulo 7 presentamos los resultados obtenidos para la sincronización en el ratchet sobreamortiguado. En el capítulo 8 revisamos algunos conceptos básicos sobre sistemas caóticos y presentamos los resultados para el caso de la sincronización en el ratchet inercial. En el capítulo 9 presentamos los resultados de la sincronización para dos partículas acopladas sobre un ratchet, este modelo está motivado por la dinámica de la cinesina. Finalmente en el capítulo 10 presentamos las conclusiones de este trabajo.

Este trabajo fue hecho en colaboración con el Dr. José Luis Mateos Trigos, investigador del Instituto de Física de la UNAM.

Capítulo 2

Movimiento Browniano

En este capítulo presentamos los conceptos básicos asociados al movimiento Browniano. Estos conceptos van a ser útiles para el desarrollo de los capítulos posteriores.

2.1. Comentarios históricos

En 1827 un famoso botánico llamado Robert Brown observó que, cuando suspendía unos pequeños granos de polen en agua, estos presentaban un movimiento irregular. Este fenómeno fue llamado Movimiento Browniano en honor a su trabajo pionero. Brown demostró que el movimiento estaba presente en cualquier suspensión de partículas finas de vidrio y minerales, por lo que descartó cualquier origen orgánico de este movimiento.

EL problema del movimiento Browniano no fue resuelto hasta que Einstein en 1905 dio una explicación satisfactoria [35]. Otra explicación alternativa la dio independientemente Smoluchowski [36].

Los dos puntos principales en la explicación de Einstein al problema del movimiento Browniano son:

 El movimiento es causado por los impactos frecuentes en el grano de polen de las moléculas del líquido, las cuales están en un movimiento incesante.

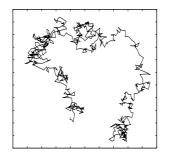


Figura 2.1: Movimiento Browniano en un plano

■ El movimiento de estas moléculas es tan complicado, que su efecto en el grano de polen puede describirse sólo probabilísticamente, en términos de los impactos frecuentes estadísticamente independientes.

La explicación de Einstein puede ser considerada para propósitos prácticos, como el primer modelo estocástico de un fenómeno natural. De los resultados de Einstein sobre la constante de difusión del movimiento Browniano, Perrin, un físico francés, determinó el número de Avogadro.

2.2. Ecuación de Langevin para el movimiento Browniano

El movimiento Browniano revela claramente las fluctuaciones estadísticas que ocurren en un sistema en equilibrio térmico [37].

Por simplicidad tratemos el problema en una dimensión. Consideremos una partícula de masa m cuya coordenada del centro de masa al tiempo t está designada por x(t) y cuya velocidad es v = dx/dt. Esta partícula está inmersa en un liquido a temperatura absoluta T. Tratar de describir la interacción de la partícula con los grados de libertad del líquido que la rodea es una tarea muy complicada. Pero el efecto de todos estos grados de libertad se puede considerar como una fuerza neta efectiva F(t) sobre la partícula. Si además la partícula interactúa con otras fuerza externas, tales como la gravedad o campos electromagnéticos, a través de una fuerza denotada por $\mathcal{F}(t)$, entonces la segunda ley de Newton puede ser escrita como

$$m\frac{dv}{dt} = \mathcal{F}(t) + F(t). \tag{2.1}$$

A partir de aquí poco se puede decir de la fuerza F(t), la cual describe la interacción de x(t) con los demás grados de libertad del sistema. Básicamente F(t) debe depender de las posiciones de muchos átomos en constante movimiento. Entonces F(t) es una función que fluctúa rápidamente en el tiempo y varia de una forma irregular, de hecho no podemos especificar la dependencia explícita de F en t. Para progresar formulemos el problema en términos estadísticos. Entonces consideremos un ensamble de muchos sistemas similares, cada uno consiste de una partícula y el medio que la rodea. Para cada uno de estos sistemas la fuerza F(t) es alguna función aleatoria de t. Entonces uno puede hacer consideraciones estadísticas del ensamble.

Los siguientes comentarios descriptivos se pueden hacer acerca de F(t): la razón a la cual varia F(t) puede ser caracterizada por un "tiempo de correlación" τ^* , el cual mide el tiempo promedio entre dos máximos (o mínimos) sucesivos de la función fluctuante F(t). Este tiempo es muy pequeño macroscópicamente hablando (generalmente es del orden de la separación intermolecular media dividida por la velocidad molecular media, esto es el tiempo de colisión). La fuerza F(t) no tiene una dirección preferencial en el espacio; entonces F(t) debe ser tanto positiva como negativa de tal forma que su promedio de ensamble es cero.

La ecuación (2.1) es válida para cada miembro del ensamble y nuestro objetivo es hacer predicciones estadísticas acerca de v. Como F(t) es una función que fluctúa rápidamente, por (2.1) se sigue que v también es una función fluctuante en el tiempo. La función v tiene una parte que varia lentamente (su promedio) y otra que fluctúa rápidamente (v')¹, cuyo promedio es cero, por lo que podemos escribir

$$v = \bar{v} + v'. \tag{2.2}$$

La parte de variación lenta \bar{v} , es crucial para determinar el comportamiento de la partícula en grandes periodos de tiempo. Para investigar su dependencia integremos la ecuación (2.1) sobre un intervalo τ , el cual es pequeño a escala macroscópica, pero es grande en el sentido de que se cumple $\tau \gg \tau^*$. Por lo que se obtiene

$$m[v(t+\tau) - v(t)] = \mathcal{F}(t)\tau + \int_{t}^{t+\tau} F(t')dt'. \tag{2.3}$$

Donde suponemos que $\mathcal{F}(t)$ es una función que varia lentamente, de tal forma que cambia por una cantidad despreciable durante el tiempo τ . La

¹A pesar de ello, \overline{F} es dominante sobre v', ya que la masa es apreciable.

integral en (2.3) debería ser muy pequeña ya que cambia muchas veces de signo en el tiempo τ . Por lo que podríamos despreciarla y escribir

$$m\frac{d\bar{v}}{dt} = \mathcal{F}. (2.4)$$

Pero este orden de aproximación es muy burdo para describir la situación física. La interacción con el ambiente expresada por F, debe ser tal que siempre tienda a restablecer a la partícula a la situación de equilibrio. Esta situación de equilibrio está caracterizada por $\bar{v}=0$. Si suponemos que la fuerza externa $\mathcal{F}=0$. La interacción expresada por F es tal que, si al tiempo inicial $\bar{v}\neq 0$, provoca que \bar{v} se aproxime gradualmente a su posición de equilibrio $\bar{v}=0$. Claramente (2.4) es incapaz de predecir este comportamiento. La razón es que la fuerza F es afectada por el movimiento de la partícula de tal forma que, F contiene una parte que varia lentamente \bar{F} , tal que tienda a restablecer a la partícula al equilibrio. Por lo que análogamente a (2.2) podemos escribir

$$F = \bar{F} + F', \tag{2.5}$$

donde F' es la parte de F que fluctúa rápidamente cuyo promedio es cero. La parte que varia lentamente \bar{F} , debe ser alguna función de \bar{v} tal que $\bar{F}(\bar{v}) = 0$, cuando $\bar{v} = 0$. Si \bar{v} no es muy grande, $\bar{F}(\bar{v}) = 0$ puede ser desarrollada en una serie de potencias de \bar{v} , cuyo primer miembro diferente de cero es lineal en \bar{v} . Entonces \bar{F} tiene la forma general de

$$\bar{F} = -\alpha \bar{v},\tag{2.6}$$

donde α es una constante positiva (llamada "coeficiente de fricción"), el signo menos indica explícitamente que la fuerza \bar{F} tiende a reducir \bar{v} a cero mientras el tiempo transcurre. El presente argumento no permite decir ninguna propiedad de α ni su magnitud. Pero podemos decir que α debe ser expresable de alguna forma en términos de F, ya que la fuerza de fricción es también causada por la interacción descrita por F(t).

Por lo que (2.3) se puede escribir como

$$m\frac{dv}{dt} = \mathcal{F} - \alpha v + F'(t), \qquad (2.7)$$

donde se ha hecho la aproximación $\alpha \bar{v} \approx \alpha v$ con error despreciable (ya que $\alpha v'$ puede ser despreciado comparado con F'(t)).

Introduciendo $\gamma \equiv \alpha/m$ y la fuerza fluctuante por unidad de masa $\xi(t) \equiv F'(t)/m$ (llamada también fuerza de Langevin) en (2.7) tenemos

$$\frac{dv}{dt} + \gamma v = \frac{\mathcal{F}}{m} + \xi(t). \tag{2.8}$$

La ecuación (2.8) es la llamada "ecuación de Langevin". Difiere de la ecuación original (2.3) por la descomposición explicita de F(t)/m, en su parte que varia lentamente $-\gamma v$ y la parte fluctuante $\xi(t)$, la cual es una función aleatoria pura, esto es, que su promedio es cero independientemente de la velocidad o la posición de la partícula.

En adelante consideraremos el caso en que la fuerza externa sea cero $(\mathcal{F}=0)$ en (2.8), por lo que tenemos

$$\frac{dv}{dt} + \gamma v = \xi(t). \tag{2.9}$$

Como ya habíamos mencionado antes, es razonable suponer que el promedio sobre el ensamble de la fuerza de Langevin, y por lo tanto de ξ , es cero²

$$\langle \xi(t) \rangle = 0. \tag{2.10}$$

Si multiplicamos dos funciones $\xi(t)$ a tiempos diferentes t y t', suponemos que el valor promedio es cero si la diferencia de tiempo t-t' es más grande que el tiempo de colisión τ^* , i.e.,

$$\langle \xi(t)\xi(t')\rangle = 0$$
 para $|t - t'| \ge \tau^*$.

Esta suposición parece razonable, ya que las colisiones de las moléculas del fluido con la pequeña partícula son aproximadamente independientes. Usualmente, el tiempo de una colisión τ^* es mucho más pequeño que el tiempo de relajación $\tau=1/\gamma$ de la velocidad de la partícula. Podemos entonces tomar el límite $\tau^* \to 0$ como una aproximación razonable, dando

$$\langle \xi(t)\xi(t')\rangle = q\delta(t-t'), \tag{2.11}$$

donde $\delta(t)$ es la función delta de Dirac y q es la intensidad del ruido.

Una posible representación de está función es

$$\delta(t) = \lim_{\epsilon \to 0} \delta_{\epsilon}(t), \tag{2.12}$$

 $^{^2\}mathrm{En}$ lo siguiente denotaremos al promedio de ensamble por $\langle\cdot\rangle$

con

$$\delta_{\epsilon} = \begin{cases} \frac{1}{\epsilon}, & -\frac{\epsilon}{2} < t < \frac{\epsilon}{2} \\ 0, & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

Si suponemos que el ruido $\xi(t)$ tiene una distribución Gaussiana, entonces a este ruido se le llama ruido blanco Gaussiano, ya que su densidad espectral $S(\omega)$ (que es la transformada de Fourier de la función de correlación (2.11)) es independiente de la frecuencia, esto es

$$S(\omega) = 2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega\tau} q\delta(\tau) d\tau = 2q.$$

En general la densidad espectral dependerá de ω y en este caso se dice que el ruido es coloreado.

Queremos ahora una solución de (2.9) con $\mathcal{F} = 0$ y con la condición inicial de que al tiempo t = 0 la variable estocástica v tiene un valor dado v_0 . Para esta condición inicial la solución de (2.9) es [13]

$$v(t) = v_0 e^{-\gamma t} + \int_0^t e^{-\gamma (t - t')} \xi(t') dt'.$$
 (2.13)

Usando (2.11) obtenemos la función de correlación de la velocidad

$$\langle v(t_1)v(t_2)\rangle = v_0^2 e^{-\gamma(t_1+t_2)} + \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} e^{-\gamma(t_1+t_2-t_1'-t_2')} q\delta(t_1'-t_2')dt_1'dt_2'.$$

Para calcular la doble integral, integramos primero sobre t'_2 . La integración sobre t'_1 es de 0 a t_2 o t_1 , cualquiera que sea menor. Tenemos entonces

$$\int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \dots dt_1' dt_2' = q \int_0^{\min(t_1, t_2)} e^{-\gamma(t_1 + t_2 - 2t_1')} dt_1' = \frac{q}{2\gamma} (e^{-\gamma|t_1 - t_2|} - e^{-\gamma(t_1 + t_2)}).$$

Por lo que el resultado de la función de correlación de la velocidad es

$$\langle v(t_1)v(t_2)\rangle = v_0^2 e^{-\gamma(t_1+t_2)} + \frac{q}{2\gamma} (e^{-\gamma|t_1-t_2|} - e^{-\gamma(t_1+t_2)}).$$
 (2.14)

Para t_1 y t_2 grandes, i.e., $\gamma t_1 \gg 1, \gamma t_2 \gg 1$, la función de correlación de la velocidad es independiente de la velocidad inicial v_0 y solamente es función de la diferencia de tiempos $t_1 - t_2$, esto es

$$\langle v(t_1)v(t_2)\rangle = \frac{q}{2\gamma}e^{-\gamma|t_1-t_2|}.$$
 (2.15)

Entonces en el estado estacionario la energía promedio de una partícula Browniana está dada por

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2} m \langle [v(t)]^2 \rangle = \frac{1}{2} m \frac{q}{2\gamma}. \tag{2.16}$$

La constante q está por la ley de equipartición de la energía de la mecánica estadística clásica,

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

donde k_B es la constante de Boltzmann y T es la temperatura absoluta. por lo que la constante q es

$$q = 2\gamma k_B T/m. (2.17)$$

2.3. Desplazamiento cuadrático medio

Para el movimiento Browniano es muy difícil medir la función de correlación de la velocidad (2.15). Es más fácil medir el desplazamiento cuadrático medio de su desplazamiento. Si suponemos que la partícula empieza en el tiempo t=0 en $x=x_0$ con la velocidad inicial v_0 , podemos calcular el desplazamiento cuadrático medio al tiempo t por

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

Aquí $\langle v(t_1)v(t_2)\rangle$ es la función de correlación de la velocidad (2.14). Como

$$\int_{0}^{t} \int_{0}^{t} e^{-\gamma(t_{1}+t_{2})} dt_{1} dt_{2} = \left(\frac{1-e^{-\gamma t}}{\gamma}\right)^{2},$$

$$\int_{0}^{t} \int_{0}^{t} e^{-\gamma|t_{1}-t_{2}|} dt_{1} dt_{2} = 2 \int_{0}^{t} dt_{1} \int_{0}^{t_{1}} e^{-\gamma(t_{1}-t_{2})} dt_{2}$$

$$= \frac{2}{\gamma} t - \frac{2}{\gamma^{2}} (1-e^{-\gamma t}),$$

entonces obtenemos

$$\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle = \left(v_0^2 - \frac{q}{2\gamma} \right) \frac{(1 - e^{-\gamma t})^2}{\gamma^2} + \frac{q}{\gamma^2} t - \frac{q}{\gamma^3} (1 - e^{-\gamma t}).$$
 (2.18)

Si empezamos no con una velocidad dada v_0 , sino con una distribución de velocidades inicial para el caso estacionario, el promedio de la velocidad al cuadrado es igual a $\langle v_0^2 \rangle = q/(2\gamma)$, ver (2.16). Entonces el primer término del lado derecho de (2.18) es cero. Para grandes t ($\gamma t \gg 1$) el término dominante es

$$\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle = 2Dt, \tag{2.19}$$

con

$$D = \frac{q}{2\gamma^2} = \frac{k_B T}{m\gamma}. (2.20)$$

El último resultado es la bien conocida relación de Einstein para la constante de difusión D.

Si estamos interesados solamente en el límite de tiempos grandes, podemos derivar (2.19) en una forma más corta. Si despreciamos la derivada temporal en (2.9) obtenemos

$$\langle v(t_1)v(t_2)\rangle \approx \frac{1}{\gamma^2} \langle \xi(t_1)\xi(t_2)\rangle = \frac{q}{\gamma^2} \delta(t_1 - t_2),$$

por lo que tenemos

$$\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle \approx \frac{q}{\gamma^2} \int_0^t \int_0^t \delta(t_1 - t_2) dt_1 dt_2 = \frac{q}{\gamma^2} t.$$

Si pensamos en la fuerza de Langevin como funciones pico sucesivas de ancho casi cero y altura casi infinita, entonces la velocidad consiste en funciones pico sucesivas con ancho $\sim \gamma$ y altura $\sim \gamma^{-1}$. Al despreciar la derivada temporal en (2.9), es equivalente a remplazar funciones pico de ancho γ por funciones pico de ancho casi cero en la velocidad.

Capítulo 3

Ecuaciones de Langevin y Fokker-Planck

Sea x una variable estocástica para la cual la ecuación de Langevin general tiene la forma [13]

$$\dot{x} = A(x,t) + B(x,t)\Gamma(t), \tag{3.1}$$

donde el punto denota la derivada temporal, A y B son funciones arbitrarias y $\Gamma(t)$ es la fuerza de Langevin, la cual supondremos que es una variable aleatoria Gaussiana con promedio cero y función de correlación δ , esto es

$$\langle \Gamma(t) \rangle = 0; \quad \langle \Gamma(t)\Gamma(t') \rangle = \delta(t - t').$$
 (3.2)

En general el término fluctuante se llama ruido multiplicativo y cuando B(x,t) es una constante, se le llama ruido aditivo.

La variable x(t) puede ser vista por motivos descriptivos como la posición de una partícula sujeta a una fuerza macroscópica A(x,t) y a una fuerza microscópica $B(x,t)\Gamma(t)$.

Como la variable x(t) es aleatoria, no podemos simplemente resolver (3.1), en vez de eso debemos considerar propiedades estadísticas de $\xi(t)$, como la densidad de probabilidad, promedios temporales o de ensamble, funciones de autocorrelación, etc.. En particular, consideremos la densidad de probabilidad W(x,t) para el proceso x(t). Para un ensamble de partículas W(x,t)dx denota la probabilidad de encontrar a la partícula entre x y x + dx al tiempo t. Específicamente, estamos interesados en la probabilidad condicional $W(x,t \mid x_0,t_0)$, que es la densidad de probabilidad de x al tiempo t para

una colección de partículas, las cuales estaban en x_0 al tiempo t_0 . Esto es, la función $W(x, t \mid x_0, t_0)$ tiene una condición inicial

$$W(x, t = 0 \mid x_0, t_0) = \delta(x - x_0), \tag{3.3}$$

donde $\delta(x)$ es la función delta de Dirac. Para procesos independientes con una densidad de probabilidad inicial $W(x_0, t_0)$ al tiempo t_0 , la densidad de probabilidad a cualquier tiempo t (posterior a t_0), puede ser obtenida por

$$W(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} W(x,t \mid x_0, t_0) W(x_0, t_0) dx_0.$$
 (3.4)

Si el proceso x(t) está gobernado por la ecuación de Langevin (3.1), entonces, la densidad de probabilidad W(x,t) está gobernada por la ecuación de Fokker-Planck [38, 39, 13]

$$\frac{\partial W(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [A(x,t)W(x,t)] + \frac{\partial^2}{\partial x^2} [B(x,t)W(x,t)]. \tag{3.5}$$

Notamos que esta ecuación puede ser escrita como una ecuación de continuidad

$$\frac{\partial W(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial J(x,t)}{\partial x} = 0, \tag{3.6}$$

donde hemos definido a la corriente de probabilidad

$$J(x,t) \equiv A(x,t)W(x,t) - \frac{\partial}{\partial x}[B(x,t)W(x,t)]. \tag{3.7}$$

Específicamente para una partícula sobreamortiguada sujeta a un potencial V(x) y a un ruido aditivo, tenemos que $A(x,t) = -(1/m\gamma)(d/dx)V(x)$ y $B(x,t) = \sqrt{D} = \sqrt{k_B T/m\gamma}$, por lo que tenemos

$$\dot{x} = -\frac{1}{m\gamma} \frac{d}{dx} V(x(t)) + \sqrt{D}\xi(t), \tag{3.8}$$

donde $\xi(t)$ es un ruido blanco Gaussiano delta correlacionado

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

con su correspondiente ecuación de Fokker-Planck (también llamada ecuación de Smoluchowski)

$$\frac{\partial W(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{V'(x)}{m\gamma} + \frac{k_B T}{m\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \right] W(x,t). \tag{3.9}$$

Por último, cabe hacer notar que la ecuación de Fokker-Planck puede ser generalizada para varias variables.

3.1. Solución estacionaria de la ecuación de Fokker Planck

Consideremos la ecuación de Fokker Planck en un proceso estacionario $(\partial_t W(x) = 0)$

$$\frac{\partial J}{\partial x} = 0,$$

lo que implica que la corriente de probabilidad J debe ser una constante. Si esta constante es cero entonces de (3.7) se sigue que

$$J = 0 = \left[A(x) - \frac{\partial}{\partial x} B(x) \right] W_{st}(x).$$

Podemos poner esta ecuación de la forma

$$A(x)W_{st} = \frac{A(x)B(x)}{B(x)}W_{st}(x) = \frac{\partial}{\partial x}B(x)W_{st}(x),$$

integrando obtenemos

$$W_{st}(x) = \frac{N}{B(x)} \exp\left(\int^x \frac{A(x')}{B(x')} dx'\right) = Ne^{-\Phi(x)}, \tag{3.10}$$

donde N es una constante de normalización, que debe ser elegida tal que

$$\int W_{st}(x) = 1.$$

En (3.10) se introdujo el potencial

$$\Phi(x) = \ln B(x) - \int^x \frac{A(x')}{B(x')} dx'.$$
 (3.11)

De la ecuación (3.11) observamos que

$$\frac{\partial \Phi(x)}{\partial x} = \frac{1}{B(x)} \frac{\partial}{\partial x} B(x) - \frac{A(x)}{B(x)}.$$

Ahora consideremos

$$\frac{\partial}{\partial x}[e^{\Phi(x)}W(x,t)] = e^{\Phi(x)}\frac{\partial W(x,t)}{\partial x} + \frac{\partial \Phi(x)}{\partial x}W(x,t)e^{\Phi(x)},$$

sustituyendo la expresión para $(\partial/\partial x)\Phi(x)$ resulta

$$\frac{\partial}{\partial x} [e^{\Phi(x)} W(x,t)] = \frac{e^{\Phi(x)}}{B(x)} \left[\frac{\partial}{\partial x} (B(x) W(x,t)) - A(x) W(x,t) \right],$$

el término en corchetes del lado derecho de la ecuación es el negativo de la corriente de probabilidad J(x), por lo que despejando obtenemos que la corriente de probabilidad se puede expresar como

$$J(x) = -B(x)e^{-\Phi(x)}\frac{\partial}{\partial x}[e^{\Phi(x)}W(x,t)]. \tag{3.12}$$

En el estado estacionario, donde J(x) es una constante arbitraria J podemos integrar (3.12) obteniendo

$$W_{st}(x) = Ne^{-\Phi(x)} - Je^{-\Phi(x)} \int^{x} \frac{e^{\Phi(x')}}{B(x')} dx'.$$
 (3.13)

Existen dos constantes de normalización en 3.13, una constante de integración está determinada por la condición de normalización

$$\int W_{st}(x)dx = 1, \tag{3.14}$$

la otra constante debe ser determinada por las condiciones de frontera del problema.

3.2. Procesos de Wiener

Obtener soluciones analíticas explicitas para la ecuación de Fokker-Planck no estacionaria es muy difícil, y sólo pueden ser encontradas para coeficientes de arrastre A(x,t) y difusión B(x,t) especiales. Por ejemplo, cuando el coeficiente de arrastre es igual a cero (A(x,t)=0) y el coeficiente de difusión es constante B(x,t)=D. Para estos valores el proceso se llama de Wiener, y la ecuación para la probabilidad de transición W=W(x,t|x',t') es la ecuación de difusión.

$$\frac{\partial W}{\partial t} = D \frac{\partial^2 W}{\partial x^2},\tag{3.15}$$

con la condición inicial

$$W(x, t'|x', t') = \delta(x - x'). \tag{3.16}$$

Para resolver (3.15) usamos la función característica

$$\phi(s,t) = \int dx W(x,t|x',t') \exp(isx), \qquad (3.17)$$

la cual obedece la ecuación

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -Ds^2\phi,\tag{3.18}$$

por lo que

$$\phi(s,t) = \exp\left(-Ds^2(t-t')\right)\phi(s,t'). \tag{3.19}$$

de (3.16), la condición inicial es

$$\phi(s,t) = \exp(isx'),\tag{3.20}$$

entonces

$$\phi(s,t) = \exp\left(isx' - Ds^2(t-t')\right). \tag{3.21}$$

Realizando una transformada de Fourier inversa tenemos que

$$W(x,t|x',t') = \frac{1}{\sqrt{4\pi D(t-t')}} \exp\left(-\frac{(x-x')^2}{4D(t-t')}\right).$$
(3.22)

Podemos realizar simulaciones numéricas a partir de la ecuación de Langevin correspondiente al proceso de Wiener para compararlas con la solución analítica (3.22). La ecuación diferencial estocástica es

$$\dot{x} = \sqrt{D}\xi(t), \quad \langle \xi(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(t)\xi(s) \rangle = \delta(t-s).$$
 (3.23)

En la siguiente sección se explica el método numérico empleado. Las simulaciones se hacen para un ensamble de 1000 partículas Brownianas con una posición inicial $x_0=0$.

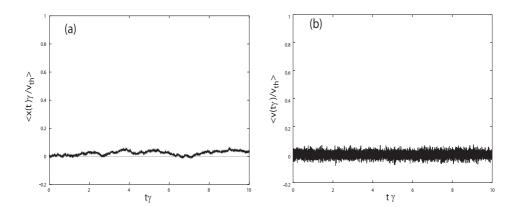


Figura 3.1: (a) Posición promedio escalada con $sqrtD/\gamma$,(b) velocidad promedio escalada con $\sqrt{\gamma D}$ para un ensamble de 1000 partículas Brownianas, las líneas continuas muestran los resultados de la simulación y las líneas punteadas los resultados analíticos.

Calculemos los promedios y comparemos con la simulación numérica :

$$\langle x(t)\rangle = \langle Z(t)\rangle = 0,$$

donde $Z(t)=\int \xi(t')dt'$ es una variable aleatoria de promedio cero(ver sección 3.3).

$$\langle x^2(t)\rangle = D \int_0^t \langle \xi^2(t)\rangle dt = Dt.$$

$$\langle \dot{x}(t) \rangle = \langle \xi(t) \rangle = 0,$$

En la figura 3.1 se muestra en (a) a la posición escalada con $sqrtD/\gamma$ y en (b) a la velocidad promedio escalada con $\sqrt{\gamma D} \equiv v_t h$. En ambas figuras vemos que el promedio de ensamble está alrededor de cero, sin embargo la posición es más suave con respecto a la velocidad.

En la figura (3.2) se muestra la posición cuadrática media escalada con D/γ . En este caso se muestra que la posición cuadrática media es proporcional al tiempo y el coeficiente de proporcionalidad es el coeficiente de difusión D. Debido a esto, en general se suele definir al coeficiente de difusión efectivo como $D_e f f = \lim_{t\to\infty} \langle (x(t) - x_0)^2 \rangle / t$.

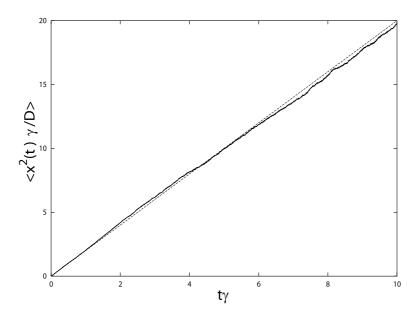


Figura 3.2: Posición cuadrática media escalada con D/γ , para un ensamble de 1000 partículas Brownianas, la línea continua muestra los resultados de la simulación y la línea punteada el resultado analítico.

La distribución de probabilidad está dada por (3.22)

$$W(x,t|x_0,t_0) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D(t-t_0)}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4D(t-t_0)}\right),\,$$

con la condición inicial

$$W(x, t_0 | x_0, t_0) = \delta(x - x_0).$$

Esta probabilidad se muestra en la figura 3.3 para un tiempo $t\gamma=2$ y una posición inicial $(\sqrt{\gamma/D})x_0=3$.

Cabe hacer notar que se realizaron otros chequeos para el algoritmo, con tiempos de primer paso y resonancia estocástica, dando resultados positivos.

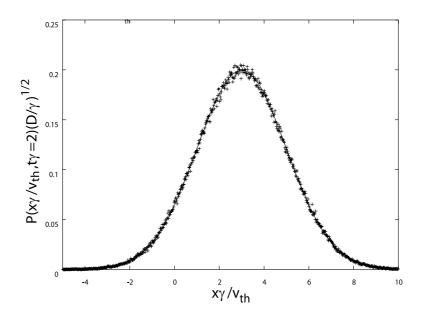


Figura 3.3: Probabilidad para un ensamble de 500,000 partículas Brownianas, las cruces muestran los resultados de la simulación, con una condición inicial $(\sqrt{\gamma/D})x_0 = 3$ a un tiempo $t\gamma = 2$

3.3. Algoritmo para resolver ecuaciones diferenciales estocásticas

Una ecuación diferencial estocástica tiene la forma general [40]

$$\dot{x}_i = f_i(\mathbf{x}) + g_i(\mathbf{x})\xi_i(t), \quad \langle \xi(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(t)\xi(s) \rangle = \delta(t-s),$$
 (3.24)

donde suponemos que el proceso estocástico es un ruido Gaussiano blanco. Denotaremos como h el tamaño del paso del tiempo. Una aproximación simple para resolver (3.24) es integrarla, después usar un desarrollo de Taylor alrededor del punto t=0, para encontrar recursivamente varias contribuciones. Para el caso unidimensional la ecuación toma la forma

$$\dot{x} = f(x) + g(x)\xi(t).$$
 (3.25)

Una integración formal da

$$x(h) - x(0) = \int_0^h (f(x(t)) + g(x(t))\xi(t))dt.$$
 (3.26)

definiendo

$$f_0 \equiv f(x(0)), \quad f'_0 \equiv \frac{\partial g(x(t))}{\partial x(t)}\Big|_{x=x(0)},$$

y algo equivalente para g(x). Desarrollando en serie de Taylor tenemos que $f(t) = f_0 + (x - x_0)f'_0 + \cdots$. A simple vista el término de orden h parece ser

$$x(h) - x(0) = \int_0^h (f(x(t)) + g(x(t))\xi(t))dt = hf_0 + g_0 \int_0^h \xi(t)dt.$$
 (3.27)

veremos que este no es el término correcto de orden h. Mientras tanto nótese que en el lado derecho de la ecuación hay lo que se llama una "integral estocástica"

$$Z(h) \equiv \int_0^h \xi(t)dt, \tag{3.28}$$

la cual es la integral sobre el rango (0,h) del proceso estocástico $\xi(t)$. Esta integral es una variable aleatoria, la integración es similar a la suma de variables Gaussianas, entonces, Z(h) es una variable Gaussiana. Lo cual implica que la distribución de probabilidad de Z(h) ésta determinada una vez que el promedio y la desviación estándar son conocidas. Un algoritmo simple sería

- generar una variable aleatoria Gaussiana, con el promedio y desviación estándar apropiados para simular la integral estocástica;
- sustituir la integral estocástica en (3.27) con esta variable aleatoria:
- integrar la ecuación usando cualquier integrador válido para la ecuación diferencial determinista.

Calculemos las propiedades estadísticas de Z(h)

$$\langle Z(h) \rangle = \int_0^h \langle \xi(t) \rangle,$$
 (3.29)

$$\langle Z(h)^2 \rangle = \int_0^h \int_0^h \langle \xi(t)\xi(s) \rangle dt ds = \int_0^h \int_0^h \delta(t-s) ds dt = \int_0^h ds = h. \quad (3.30)$$

Si introducimos una variable aleatoria de promedio cero y desviación estándar 1, Y, podemos representar a Z(h) como

$$Z(h) = \sqrt{h}Y, \tag{3.31}$$

por lo que podemos rescribir (3.27) como

$$x(h) - x(0) = hf_0 + \sqrt{hg_0}Y. (3.32)$$

Podemos notar que el primer término del lado derecho de la ecuación es de orden h, mientras que el segundo término es de orden \sqrt{h} , por lo que debemos tomar otro término del desarrollo de Taylor para g(x)

$$x(h) - x(0) = hf_0 + g_0 Z(h) + g_0' \int_0^h (x(t) - x_0) \xi(t) dt,$$
 (3.33)

utilizando (3.27) en la integral y tomando sólo los términos de orden h tenemos

$$x(h) - x(0) = hf_0 + g_0 Z(h) + g_0' g_0 \int_0^h Z(t) \xi(t) dt,$$
 (3.34)

como $\xi(t)dt = dZ$ nos queda

$$x(h) - x(0) = hf_0 + g_0 Z(h) + \frac{1}{2} g_0' g_0 [Z(h)]^2.$$
 (3.35)

Para ruido aditivo $g(x) = \sqrt{2D}$ =cte. tenemos varios algoritmos:

Euler

$$x(h) = x(0) + hf_0 + g_0 Z(h). (3.36)$$

Precisión O(h).

Heun

$$x1 = x(0) + hf_0 + \sqrt{2D}Z(h),$$

$$x(h) = x(0) + \sqrt{2D}Z(h) + \frac{h}{2}(f_0 + f(x_1)).$$
 (3.37)

Precisión $O(h^2)$.

"Propagador exacto"

Resolver exactamente $\dot{x} = f(x)$ y después sumar Z(h) para tomar en cuenta el ruido. Sin error numérico por definición. En la práctica este algoritmo es obtenido usando un algoritmo de integración de alto orden para la parte determinista (por ejemplo un Runge-Kutta de cuarto orden).

Capítulo 4

Movimiento Browniano en potenciales periódicos

En el capítulo anterior se obtuvo la solución general para la densidad de probabilidad. En este capítulo nos vamos a enfocar a la solución general para potenciales periódicos. En particular nos interesa calcular la corriente promedio.

Como vimos en el capítulo anterior, un proceso de Wiener esta gobernado por la ecuación de difusión (3.15). Este proceso representa a una partícula Browniana en ausencia de potenciales. Esta partícula se difunde libremente y su posición cuadrática media es proporcional al tiempo y al coeficiente de difusión D. Cuando existe un potencial, las partículas ya no pueden difundirse libremente, pero, debido a las fuerzas de Langevin las partículas pueden saltar de un pozo del potencial a otro contiguo, e incluso después de un tiempo pueden estar en pozos más alejados. Para tiempos suficientemente grandes las partículas se habrán difundido en ambas direcciones del eje x. Está difusión puede ser descrita por un coeficiente de difusión efectivo D_{eff} , que cumple con la relación

$$\langle [x(t) - \langle x(t) \rangle]^2 \rangle = 2D_{ef}t.$$
 (4.1)

Sin embargo, aunque exista una difusión efectiva de las partículas, en promedio no van ninguna parte, esto es, su velocidad promedio sigue siendo cero. Si aplicamos ahora una fuerza adicional F constante, las partículas preferirán difundirse en la dirección de la fuerza y en promedio la velocidad promedio es diferente de cero (llamada velocidad de arrastre), la cual dependerá en

general de F. Para fuerzas pequeñas podemos definir a la movilidad μ como

$$\langle v \rangle = \mu F. \tag{4.2}$$

Como ya hemos visto, la ecuación de movimiento de la partícula está dada por la ecuación de Langevin

$$m\gamma \dot{x} + V'(x) = F + m\gamma \sqrt{2D}\xi(t), \tag{4.3}$$

donde V(x) = V(x+L) es un potencial periódico de periodo L, V'(x) denota la derivada de V(x)con respecto a x, γ es el coeficiente de fricción divido por la masa m de la partícula, F es una fuerza constante y $\xi(t)$ representa un ruido blanco Gaussiano de promedio cero y con función de correlación dada por

$$\langle \xi(t)\xi(t')\rangle = \delta(t - t'),\tag{4.4}$$

donde $\delta(t)$ es la función delta de Dirac y D es el coeficiente de difusión

$$D = \frac{k_B T}{m\gamma},\tag{4.5}$$

donde k_B es la constante de Boltzmann y ${\cal T}$ es la temperatura.

Podemos escribir un potencial efectivo V(x) = V(x) - xF, el cual se puede representar como "potencial inclinado".

4.1. Normalización de las ecuaciones de Fokker Planck y de Langevin

Para tratamientos posteriores es conveniente trabajar con cantidades adimensionales usando las siguientes variables, parámetros y potenciales

$$x_n = x/L; t_n = v_0 t/L;$$

$$\gamma_n = \gamma L/v_0; D_n = \gamma D/v_0^2; (4.6)$$

$$F_n = LF/mv_0^2; V_n = V/mv_0^2 ;$$

$$\frac{dV_n}{dx_n} = \frac{L}{mv_0^2} \frac{dV}{dx}; \xi_n(t_n) = \sqrt{\frac{L}{v_0}} \xi(t),$$

donde el parámetro v_0 es una velocidad característica del sistema, la cual pude ser la velocidad térmica $v_{th} = \sqrt{k_B T/m}$ u otra velociad en función de los parámetros del sistema, por ejemplo $v_0 = \gamma L$.

Bajo esta normalización la ecuación de Langevin (4.3) se transforma en

$$\gamma_n \frac{dx_n}{dt_n} + \frac{dV_n}{dx_n} = F_n + \sqrt{2D_n \gamma_n} \xi_n(t_n); \quad V_n(x_n + 1) = V_n(x_n),$$
$$\langle \xi_n(t_n) \xi_n(t'_n) \rangle = \delta(t_n - t'_n).$$

En los desarrollos posteriores omitiremos el índice n, esto es, trabajaremos con la ecuación

$$\gamma \frac{dx}{dt} + \frac{dV(x)}{dx} = F + \sqrt{2D\gamma}\xi(t); \quad V(x+1) = V(x), \tag{4.7}$$

$$\langle \xi(t)\xi(t')\rangle = \delta(t - t'). \tag{4.8}$$

Como ya hemos visto la ecuación de Fokker Planck correspondiente a (4.7) es

$$\frac{\partial W(x,t)}{\partial t} = \frac{1}{\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \left(V'(x) - F + D \frac{\partial}{\partial x} \right) W(x,t) = -\frac{\partial J(x,t)}{\partial x}, \tag{4.9}$$

donde J(x,t) es la densidad de corriente definida por

$$J(x,t) = \frac{1}{\gamma} \left(F - V'(x) - D \frac{\partial}{\partial x} \right) W(x,t). \tag{4.10}$$

4.2. Solución estacionaria

Es conveniente para cálculos posteriores considerar el potencial efectivo U(x), al cual está sujeta la partícula Browniana, esto es

$$U(x) = V(x) - Fx. (4.11)$$

Este potencial tiene la propiedad

$$U(x+n) = U(x) - nF, (4.12)$$

donde n es un número entero y se ha usado el hecho de que V(x) es periódico.

Como ya hemos visto, en el estado estacionario la corriente de probabilidad es una constante J y la solución para W(x) está dada por (3.13), donde $\Phi(x)$ está dado por (3.11). Calculando Φ obtenemos que

$$\Phi(x) = \frac{U(x)}{D} + \text{cte.}$$

Como el potencial V(x) está indeterminado hasta una constante, podemos omitir sin pérdida de generalidad a la constante de la ecuación anterior, obteniendo

$$\Phi(x) = \frac{U(x)}{D}. (4.13)$$

La densidad de corriente puede escribirse como

$$\gamma J = [F - V'(x)]W(x) - D\frac{\partial W(x)}{\partial x}, \tag{4.14}$$

y la función de distribución como

$$W(x) = e^{-U(x)/D} [N - \gamma(J/D) \int_0^x e^{U(x')/D} dx']. \tag{4.15}$$

Veamos que la distribución es periódica. Para hacer esto, consideremos primero la integral $(0 \le x < 1)$

$$\int_0^{n+x} e^{U(x')/D} dx' = \int_0^1 e^{U(x')/D} dx' + \ldots + \int_{n-1}^n e^{U(x')/D} dx' + \int_n^{n+x} e^{U(x')/D} dx'.$$

Haciendo un cambio de variable para la j-ésima integral $(j=0,\ldots,n)$, de la forma u=x'-j, tomando en cuenta la propiedad (4.12) y definiendo a I como

$$I = \int_0^1 e^{U(x')/D} dx', \tag{4.16}$$

podemos escribir

$$\int_0^{n+x} e^{U(x')/D} dx' = I + Ie^{-F/D} + \dots + Ie^{-(n-1)F/D} + \int_0^x e^{U(x')/D} dx'$$
$$= I[1 + e^{-F/D} + \dots + (e^{-F/D})^{n-1}] + \int_0^x e^{U(x')/D} dx',$$

el término del corchete es una suma geométrica y puede calcularse fácilmente, por lo que la integral puede escribirse como

$$\int_0^{n+x} e^{U(x')/D} dx' = I\left(\frac{1 - e^{-nF/D}}{1 - e^{-F/D}}\right) + \int_0^x e^{U(x')/D} dx'.$$

Por lo tanto

$$W(x+n) = e^{-U(x+n)/D} [N - \gamma(J/D) \int_0^{x+n} e^{U(x')/D} dx'],$$

utilizando (4.12), remplazando la integral y factorizando los términos que tengan dependencia en n tenemos

$$W(x+n) = e^{-U(x)/D} \left[N - \frac{\gamma JI}{D(1 - e^{-F/D})} \right] e^{nF/D}$$

$$+ e^{-U(x)/D} \left[\frac{\gamma JI}{D(1 - e^{-F/D})} - \gamma \frac{J}{D} \int_0^x e^{U(x')/D} dx' \right]. (4.17)$$

Para F > 0 (F < 0), esta expresión está acotada para $n \to \infty$ $(n \to -\infty)$ si el primer corchete del lado derecho es cero, esto es

$$\gamma JI = DN(1 - e^{-F/D}). \tag{4.18}$$

Por lo tanto tomando en cuenta esta ultima ecuación y comparando (4.17) con (4.15) obtenemos la relación buscada

$$W(x+1) = W(x). (4.19)$$

Como W(x) es periódica, debemos normalizarla en el intervalo de periodicidad, esto es

$$\int_{0}^{1} W(x)dx = N \int_{0}^{1} e^{-U(x)/D} dx - \gamma(J/D) \int_{0}^{1} e^{-U(x)/D} \left(\int_{0}^{x} e^{U(x')/D} dx' \right) dx$$

$$= 1. \tag{4.20}$$

Calculemos ahora la velocidad promedio

$$\langle v \rangle = \langle \dot{x} \rangle = \gamma^{-1} \langle F - V'(x) + \sqrt{2\gamma D} \xi(t) \rangle$$

$$= \gamma^{-1} \langle F - V'(x) \rangle = \gamma^{-1} \int_0^1 [F - V'(x)] W(x) dx$$

$$= \gamma^{-1} \int_0^1 (\gamma J + D \partial W / \partial x) dx = J. \tag{4.21}$$

Para derivar este resultado hemos tomando en cuenta (4.7,4.14,4.19).

Las dos ecuaciones (4.20,4.18) determinan las constantes de integración N y J. Despejando N de (4.20) y sustituyendo en (4.18) obtenemos una expresión para J, la cual puede ser sustituida en (4.21) obteniendo

$$\gamma \langle v \rangle = \frac{D(1 - e^{-F/D})}{\int_0^1 e^{U(x)/D} dx \int_0^1 e^{-U(x)/D} dx - (1 - e^{-F/D}) \int_0^1 e^{-U(x)/D} \int_0^x e^{U(x')/D} dx dx'}.$$
(4.22)

Es importante notar que si la fuerza externa F es cero, la velocidad promedio también es cero independientemente de la forma del potencial.

Capítulo 5

Motores Brownianos

En el capitulo anterior observamos que la velocidad promedio es diferente de cero sólo se aplica una fuerza constante que inclina al potencial. En este capitulo discutimos la forma de obtener una velocidad promedio diferente de cero si sólo actúan fuerzas de promedio cero.

5.1. Máquinas de movimiento perpetuo

Las máquinas de movimiento perpetuo son máquinas hipotéticas que pueden producir energía útil de la "nada". La existencia de dicha máquina viola las leyes de la física. Las máquinas de movimiento perpetuo se clasifican en dos categorías, definidas según la ley que deben violar para ser una legítima máquina de movimiento perpetuo. Estas categorías son llamadas "máquinas de movimiento perpetuo del primer tipo" o "máquinas de movimiento perpetuo del segundo tipo".

La primera ley de la termodinámica es en esencia un enunciado de conservación de la energía. La segunda ley de la termodinámica tiene varios enunciados, el más intuitivo tal vez sea que el calor siempre fluye del lugar más caliente al lugar más frío; el más conocido es que la entropía siempre incrementa; otro enunciado es que ninguna máquina trabajando en ciclos es más eficiente que la máquina de Carnot.

Las máquinas de movimiento perpetuo del primer tipo producen más energía de la que consumen, por lo que la máquina puede continuar trabajando por siempre. Esta acción viola la primera ley de la termodinámica.

Las máquinas de movimiento perpetuo del segundo tipo son aquellas que

convierten *completamente* el calor en otras formas de energía. Estas máquinas violan la segunda ley de la termodinámica.

Se ha realizado trabajo teórico serio que involucra experimentos pensados, para probar los límites del entendimiento de las leyes de la física, por ejemplo: El demonio de Maxwell [41], el ratchet Browniano de Feynman [42].

El demonio de Maxwell, un ser hipotético de tamaño molecular que está sentado al lado de una puerta que separa a dos contenedores denotados por A, B. En estos contenedores se encuentra un gas en equilibrio térmico. Este demonio posee la información para todo tiempo de la posición y velocidad de las partículas de ambos contenedores. El demonio abre y cierra la puerta de manera que sólo deja pasar a las partículas más rápidas de B a A, y sólo las más lentas de A a B. El objetivo es colectar las partículas que tienen una velocidad mayor a la velocidad promedio en el contenedor A y a las que tienen una velocidad menor que la velocidad promedio en el contenedor B.

Al final obtenemos un gas caliente de alta presión en un extremo, y un gas menos caliente de baja presión en el otro extremo. La primera ley de la termodinámica no se ha violado, pero se ha redistribuido la energía cinética al azar de las moléculas (calor), de tal manera que la energía puede ser extraída del sistema.

En el experimento pensado de Maxwell, el demonio administra al sistema de tal forma que la entropía disminuye, en otras palabras se incrementa la cantidad de energía disponible, incrementando su conocimiento del movimiento de las partículas. La segunda ley de la termodinámica dice que es imposible: Sólo se puede incrementar la entropía (o disminuirla en algún lugar siempre que al menos esté balanceada con el incremento en algún otro lugar). Para una discusión detallada del demonio de Maxwell ver [41].

El ratchet Browniano de Feynman se discute en la siguiente sección.

5.2. Ratchet de Feynman

El ratchet de Feynman es un aparato con una hélice de paletas simétricas unida por un rodillo a un engranaje con dientes asimétricos (Figura 5.1). Atascado en los dientes está una lengüeta, que sirve para evitar que el engranaje dé vueltas libremente; esta lengüeta es empujada con un resorte para mantenerla en su lugar. Si ahora lo rodeamos con un gas en equilibrio térmico, las moléculas al azar de este gas impartirán su energía cinética a las paletas, provocando que giren rápidamente hacia atrás y hacia adelante, dando



Figura 5.1: Representación pictórica de un Motor Browniano.

lugar a una especie de movimiento Browniano rotatorio. El truco es que la lengüeta se detenga en los dientes asimétricos, permitiendo el movimiento en una dirección (llamada "adelante") y evitando que gire el engranaje en la dirección opuesta ("atrás"). Parece convincente que este sistema realice sistemáticamente en promedio una rotación en una dirección e incluso si un pequeño peso en dirección opuesta es aplicado.

A pesar de la asimetría construida el sistema no tiene una dirección preferencial de rotación, de otra forma violaría la segunda ley de la termodinámica por ser una máquina de movimiento perpetuo del segundo tipo. Este sistema ya había sido discutido por Smoluchowski en 1912 y popularizado después por Feynman [42]. El error esta en la suposición del funcionamiento de la lengüeta: como los impactos de las moléculas son considerados a escala microscópica, la lengüeta necesita ser de escala microscópica también, por lo que las fluctuaciones térmicas no son despreciables. Entonces, debido a los impactos de las moléculas del gas, la lengüeta se levanta eventualmente, permitiendo así que el engranaje gire libremente. El resultado neto es que no hay un movimiento promedio rotacional preferencial, estando de acuerdo con la segunda ley de la termodinámica.

Para obtener una maquina que funcione como se espera, necesitamos aplicar una fuente externa de energía para sacar del equilibrio al sistema. Feynman propuso sacar del equilibrio al sistema poniendo al resorte más frío que las paletas, asegurándose así que el resorte sea menos susceptible a los impactos que las paletas, obteniendo de esta manera un movimiento unidireccional en promedio. En este caso el aparato ya no viola la segunda ley de la termodinámica, ya que el sistema está fuera del equilibrio térmico, por lo que la segunda ley de la termodinámica ya no es válida.

A pesar de que hubo contribuciones en el área de los ratchets después de Feymann [6], no fue hasta que Ajdari y Prost [43] en 1992, Magnasco [44] en 1993 y los artículos seminales de 1994 [18, 19, 45, 46, 47, 48, 49], que hubo una creciente actividad de trabajos teóricos y experimentales sobre los motores Brownianos. En parte, el crecimiento del área de los motores Brownianos es motivado por la investigación del transporte intracelular, específicamente por los motores moleculares [45, 48, 49, 50] y las bombas moleculares [51]. Investigaciones posteriores incluyen los ratchet cuánticos [14, 52], potenciales ratchet para fluxones en arreglos de uniones Josephson [53, 54], efecto ratchet en átomos fríos usando una red óptica asimétrica [55], efecto ratchet para reducir la densidad de vórtices en superconductores [15]. Ejemplos típicos de ratchet son: ratchet mecidos (rocking ratchet)[44], ratchet destellantes (flashing ratchet)[20], ratchet de difusión (diffusion ratchet) [56], ratchet de correlación (correlation ratchet) [46, 57] y ratchet de tiro de ruido blanco (white-shot-noise ratchet) [58]. Para una revisión sobre motores Brownianos ver [4, 5, 7, 10, 59].

5.3. Modelo simplificado estocástico

En vez de modelar la maquinaria del ratchet de Feynman, trabajaremos con un modelo simple [6], pero que mantiene los elementos esenciales del ratchet de Feynman. Consideremos una partícula Browniana de masa m en una dimensión con coordenada x(t). La ecuación de movimiento es

$$m\frac{d^2x}{dt^2} + m\gamma\frac{dx}{dt} + \frac{dV(x)}{dx} = F + m\gamma\sqrt{2D}\xi(t),$$
 (5.1)

donde V(x) es el potencial periódico y asimétrico

$$V(x) = V_1 - V_0 \left[\sin \left(2\pi \left(\frac{x - x_0}{L} \right) \right) + \frac{1}{4} \sin \left(4\pi \left(\frac{x - x_0}{L} \right) \right) \right], \tag{5.2}$$

llamado potencial ratchet. Aquí L es el periodo del ratchet, esto es V(x+L) = V(x). $\xi(t)$ representa un ruido blanco Gaussiano con función de correlación

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

El ambiente donde están los motores moleculares es un ambiente donde las fuerza asociadas a la viscosidad son predominantes. Para ver esto utilizamos el número de Reynolds. El número de Reynolds es un parámetro adimensional que compara el efecto de la fuerza inercial con la fuerza debido a la viscosidad¹, y se puede escribir como

$$R = \frac{av\rho}{\eta} = \frac{F_{\text{ine}}}{F_{\text{vis}}},\tag{5.3}$$

donde a y v son una distancia y una velocidad característica del sistema, ρ es la densidad del fluido, η es la viscosidad del fluido, $F_{\rm ine}$ es la fuerza asociada a la inercia y $F_{\rm vis}$ es la fuerza asociada a la viscosidad.

Por ejemplo [5], para el agua $\rho \sim 1 gr/cm^3$ y $\eta \sim 10^{-2} gr/(cm \cdot seg)$. Para un molusco en el agua de 10 cm de longitud y a una velocidad de 10 cm/seg, el número de Reynolds es R=100. Sin embargo, para una bacteria de $10^{-3} cm$ de longitud y a una velocidad de $v=10^{-3} cm/seg$, el número de Reynolds es $R=10^{-4}$. Entonces para esta bacteria, la fuerza de inercia $F_{\rm ine}$ es 10^{-4} veces más pequeña que la fuerza asociada a la fricción $F_{\rm vis}$, por lo que la dinámica se puede aproximar por una dinámica sobreamortiguada sin problemas.

Para los sistemas en los que estamos interesados la escala característica es $\sim 10^{-8} m$, por lo que los sistemas que estamos tratando tienen números de Reynolds muy pequeños. Por lo tanto podemos aproximar la dinámica, a una dinámica sobre amortiguada. Esto es, la ecuación de movimiento es

$$m\gamma \dot{x} = F - \frac{dV(x)}{dx} + m\gamma \sqrt{2D}\xi(t). \tag{5.4}$$

Es conveniente trabajar con variables adimensionales. Para ello tomemos como tiempo característico a γ^{-1} y como longitud característica L. Definiendo las variables adimensionales:

$$x_n = x/L, t_n = t\gamma,$$

 $^{^1{\}rm Este}$ parámetro se obtiene a partir de la forma adimensional de la ecuación de Navier-Stokes.

$$F_n = F/m\gamma^2 L, \quad D_n = D/\gamma L^2, \tag{5.5}$$

$$x_{0n} = x_0/L$$
. $V_{0n} = V_0/m\gamma^2 L^2$.

Tenemos que la ecuación de movimiento para x_n es

$$\dot{x}_n = F_n - \frac{dV(x_n)}{dx_n} + \sqrt{2D_n}\xi(t_n), \tag{5.6}$$

donde $V(x_n)$ es el potencial ratchet adimensional

$$V(x_n) = -V_{0_n}[C + \sin(2\pi(x_n - x_{0_n})) + \frac{1}{4}\sin(4\pi(x_n - x_{0_n}))].$$
 (5.7)

Quitando el subíndice n a las variables tenemos

$$\dot{x} = F - V'(x) + \sqrt{2D}\xi(t), \tag{5.8}$$

donde la prima denota la derivada con respecto a x y el potencial ratchet adimensional es

$$V(x) = -V_0[C + \sin(2\pi(x - x_0)) + \frac{1}{4}\sin(4\pi(x - x_0))], \qquad (5.9)$$

donde $C \simeq -1.1$ y $x_0 \simeq -.19$, son dos constantes tal que el mínimo del potencial está localizado en el origen (ver figura 5.2). El ruido blanco Gaussiano tiene la unción de correlación

$$\langle \xi(t)\xi(t')\rangle = \delta(t - t'). \tag{5.10}$$

Como vimos en el capítulo anterior, la ecuación de Langevin (5.8) tiene asociada una ecuación de Fokker-Planck (EFP). Para nuestro caso la EFP está dada por (4.9)

$$\frac{\partial W(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(V'(x) - F + D \frac{\partial}{\partial x} \right) W(x,t) = -\frac{\partial J(x,t)}{\partial x}, \tag{5.11}$$

donde J(x,t) es la densidad de corriente definida por

$$J(x,t) = \left(F - V'(x) - D\frac{\partial}{\partial x}\right)W(x,t),\tag{5.12}$$

La cantidad de más importancia en el transporte de partículas es la corriente de la partícula definida como el promedio de ensamble de la velocidad $\langle v \rangle = \langle \dot{x} \rangle$. En la siguiente sección veremos la expresión analítica de esta cantidad tan importante.

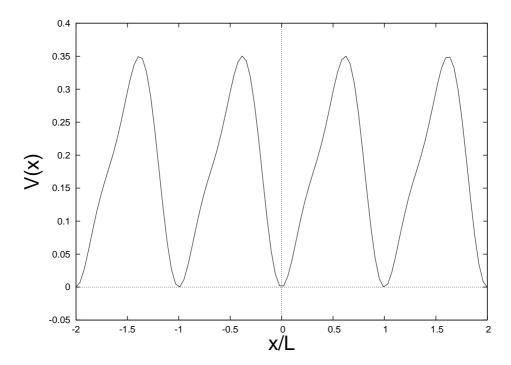


Figura 5.2: Potencial ratchet adimensional (5.9) para $V_0 = 1/2\pi$.

5.3.1. Solución estacionaria

La solución general se obtuvo en el capitulo anterior, llegando a la ecuación (4.22).

$$\langle v \rangle = \frac{D(1 - e^{-F/D})}{\int_0^1 e^{U(x)/D} dx \int_0^1 e^{-U(x)/D} dx - (1 - e^{-F/D}) \int_0^1 e^{-U(x)/d} \int_0^x e^{U(x')/D} dx dx'},$$
(5.13)

donde F es una fuerza constante, D es el coeficiente de difusión, U(x) = V(x) - Fx (ver figura 5.3) y V(x) es el potencial ratchet (5.9). Es importante notar que independientemente de la forma del potencial, si la fuerza constante F es cero, la velocidad promedio es cero. Esto es una consecuencia de la segunda ley de la termodinámica. No se puede obtener transporte directo a partir de las fluctuaciones térmicas de un solo baño térmico. A pesar de la asimetría del espacio debido al potencial ratchet, el efecto del baño térmico hacia la partícula es simétrico.

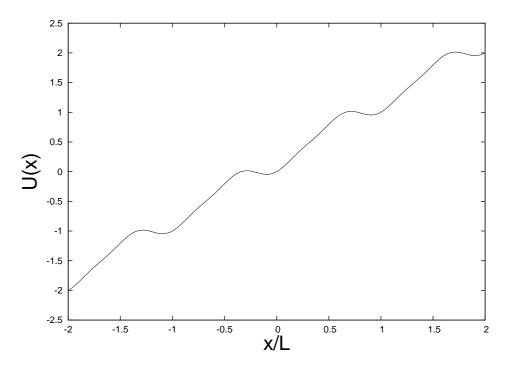


Figura 5.3: Potencial ratchet inclinado U(x)=V(x)-Fx, para F=-1 y $V_0=1/2\pi$.

La densidad de probabilidad para el caso estacionario con F=0 está dada por la distribución de Maxwell

$$W(x) = Ne^{-V(x)/D},$$
 (5.14)

donde N es una constante de normalización dada por

$$N = \left(\int_0^1 e^{-V(x)/D} dx\right)^{-1}.$$

Para el caso de $F \neq 0$, esperamos que la velocidad promedio sea diferente de cero y que tenga el mismo signo que F. Esto es debido a que la partícula siente un potencial efectivo U(x) = V(x) - Fx, que se puede visualizar como el ratchet inclinado, por ejemplo para F < 0, el ratchet está inclinado hacia la izquierda (ver figura 5.3), empujando a las partículas en promedio hacia la izquierda, por lo que la $\langle \dot{x} \rangle < 0$. Cerca de F = 0 podemos desarrollar la

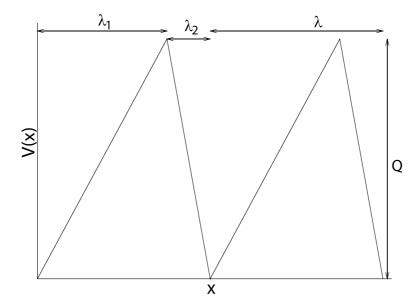


Figura 5.4: Potencial ratchet f(x) lineal a trozos, λ_1 y λ_2 son el ancho de cada segmento; el periodo del potencial es $\lambda = \lambda_1 + \lambda_2$; el ancho de simetría rota es $\Delta = \lambda_1 - \lambda_2$.

exponencial en (5.13) y quedarnos hasta primer orden, en este caso es claro que la velocidad promedio es proporcional a F.

El problema ahora es resolver las integrales que se encuentran en (5.13). Debido a la forma del potencial, no es posible resolverlas analíticamente. En estos casos se puede recurrir a otra representación para el potencial ratchet, una representación lineal a trozos [60], (ver figura 5.4). Sin embargo, esta representación no es práctica para implementarla en un algoritmo que resuelva las integrales numéricamente, ya que la fuerza (derivada del potencial) no es continua, por lo que no usaremos esta representación.

Una forma de visualizar el comportamiento de (5.13) para el potencial ratchet suave (5.9) es realizar las integrales numéricamente, también podemos partir desde la ecuación de Langevin (5.8), y realizar promedios temporales y de ensamble para obtener la velocidad promedio en el estado estacionario.

En la figura 5.5 se muestra la velocidad promedio estacionaria contra la fuerza de inclinación y como se esperaba el signo de la corriente coincide con el signo de F. La curva es simétrica para el orden dominante (respuesta

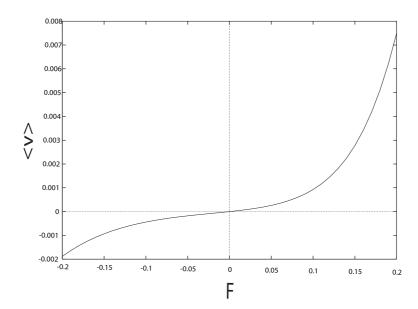


Figura 5.5: Velocidad promedio estacionaria vs. la fuerza de inclinación, obtenida a partir de $(5.13), V_0 = 1/2\pi$ y D=0.1.

lineal), pero no las contribuciones siguientes. El hecho de que la corriente sea diferente de cero, implica que el sistema no está en equilibrio térmico.

5.4. Efecto ratchet

Como ya hemos visto en la sección anterior, para un sistema en equilibrio la velocidad promedio es cero, a pesar de la asimetría debida al potencial ratchet. Lo cual resulta congruente con la segunda ley de la termodinámica. También vimos que si aplicamos una fuerza constante F para sacar al sistema del equilibrio, obtenemos una velocidad promedio diferente de cero, que concuerda en dirección con la fuerza F. Este resultado es de esperarse y no resulta sorprendente ya que aplicamos una fuerza constante en magnitud y dirección.

Ahora consideremos una fuerza $F_D(t)$ cuyo promedio temporal y de ensamble sea cero. Apliquémosla al sistema para llevarlo fuera del equilibrio. Esta fuerza puede ser determinista o estocástica.

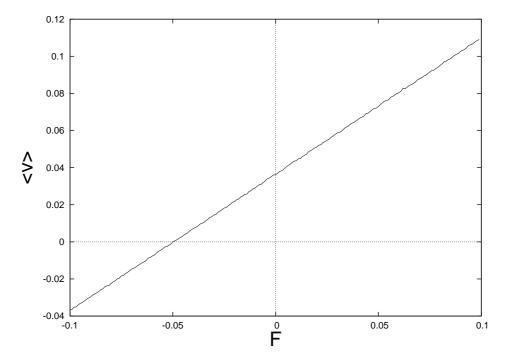


Figura 5.6: Velocidad promedio estacionaria vs. la fuerza de inclinación, se muestra que la velocidad promedio es diferente de cero para F=0. $F_D(t)=F_D\sin(\omega_D t)$, con $F_D=1$, $\omega_D=.6$, $V_0=1/2\pi$ y D=0.1.

$$\dot{x} = F - f'(x) + F_D(t) + \sqrt{2D}\xi(t). \tag{5.15}$$

Lo que obtenemos es un motor Browniano capaz de realizar trabajo. La velocidad promedio estacionaria en función de F se muestra en la figura 5.6. Como podemos observar la velocidad promedio es diferente de cero para F=0, e incluso su dirección es opuesta para un intervalo de F. Esto es, realizamos trabajo en contra de la fuerza F llevando a la partícula en dirección opuesta a F. Este fenómeno se llama "efecto ratchet".

La forma más común de explicar el efecto ratchet es con el ratchet de encendido-apagado. El ratchet de la figura 5.4 se prende y apaga con periodo τ_* (Figura 5.7). Cuando el ratchet está encendido y la energía térmica k_BT es menor que la altura del potencial, la distribución de probabilidad está centrada en un mínimo del potencial. Después de medio periodo se apaga el ratchet, por lo que ahora la partícula se puede difundir libremente (con coeficiente de

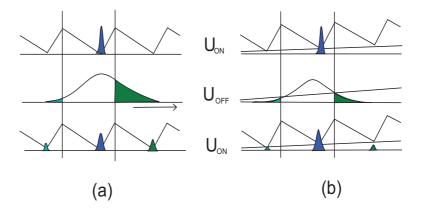


Figura 5.7: Esquema del efecto ratchet donde se muestra un periodo de encendido apagado,(a) F = 0,(b) $F \neq 0$.

difusión $D = k_B T/m\gamma$) con la misma probabilidad para ambas direcciones. Después se vuelve a prender el ratchet, obligando a la partícula a moverse hacia un mínimo del potencial. Como el potencial ratchet es asimétrico la partícula se desplaza en promedio hacia una dirección.

La energía para mover la partícula no viene del baño térmico, sino que se obtiene al encender el potencial, sin embargo el baño térmico juega un papel importante, sin él, la partícula se quedaría en el origen.

Otro fenómeno importante asociado a los ratchet son las inversiones de corriente y pueden ser generadas variando un parámetro del sistema [47, 61, 62, 63]. Las inversiones de corriente son muy importantes para la creación de nuevos aparatos para la separación de partículas [64].

Capítulo 6

Sincronización

Dado que nos interesa abordar el problema de la sincronización en ratchets en los próximos capítulos, en este capítulo revisaremos los conceptos básicos sobre sincronización [12, 28], así como también definiremos la fase de un oscilador caótico o estocástico.

El origen de la palabra sincronización es de raíz griega, que significa "ocurrir en el mismo tiempo". El significado original de esta palabra se ha mantenido hasta hoy en el uso coloquial, como un acuerdo o correlación en el tiempo de diferentes procesos.

Históricamente, el análisis del fenómeno de sincronización en la evolución de sistemas dinámicos ha sido estudiado desde los principios de la física. Empezó en el siglo XVII, donde Huygens encontró que dos relojes de péndulo acoplados débilmente (colgados de la misma viga), se vuelven sincronizados en fase.

Inicialmente el fenómeno de sincronización fue investigado en aparatos hechos por el hombre, desde el reloj péndulo hasta instrumentos musicales, generadores eléctricos, sistemas de poder eléctricos y láser. Donde se encontró numerosas aplicaciones en ingeniería eléctrica y mecánica. Ahora el foco de atención de la investigación se ha movido hacia los sistemas biológicos, donde la sincronización se ha encontrado en diferentes niveles. Sincronización del pulso de neuronas, ajuste entre el ritmo del corazón con el respiratorio y/o locomotor, diferentes formas de comportamiento cooperativo entre insectos, animales e incluso entre humanos, estos son sólo ejemplos de un sólo fenómeno natural fundamental: sincronización.

Estamos rodeados por objetos oscilantes, no sólo en física, si no también en las ciencias de la vida [27, 29]. Algunos ejemplos de sincronización son:

radio comunicaciones y equipo eléctrico, violines en una orquesta, luciérnagas que emiten secuencias de pulsos de luz, pájaros que aletean sus alas, sistemas químicos que exhiben variaciones oscilatorias de la concentración de reactantes. Todos estos sistemas y muchos otros tienen una característica en común: producen un ritmo. Usualmente estos objetos no están asilados de su ambiente, si no que interactúan con otros objetos, esto es, que son un sistema abierto. Relojes biológicos que regulan los ciclos diarios, están sujetos al día y la noche, a las variaciones de temporadas en iluminación y temperatura, un violinista ove el tono tocado por sus vecinos, un luciérnaga es influenciada por la emisión de luz de toda la población etc. Esta interacción puede ser muy débil, en ocasiones imperceptible, pero a menudo causa una transición cualitativa: un objeto ajusta su ritmo de acuerdo al ritmo de otros objetos. Como resultado, un violinista toca al unísono, insectos en la población emiten pulsos acústicos o luminosos con un ritmo común, pájaros en una parvada aletean sus alas simultáneamente, el corazón de un caballo galopando se contrae una vez por un ciclo locomotor.

Este ajuste de ritmos debido a una interacción es la esencia de la sincronización.

Para ilustrar esta definición general tomemos el clásico ejemplo de un reloj péndulo.

Osciladores auto sostenidos: un modelo de objetos oscilantes

Discutamos como funciona un reloj. Su mecanismo transforma la energía potencial de un peso en altura (o de un resorte comprimido o de una batería), en el movimiento oscilatorio del péndulo. En su recorrido, esta oscilación es transferida en la rotación de las manecillas del reloj. No estamos interesados en el diseño particular del reloj. Lo que es importante es que este toma energía de una fuente y mantiene una oscilación estable del péndulo. El cual continúa sin ningún cambio hasta que se agota la fuente de energía. La siguiente propiedad importante es que la forma exacta del movimiento oscilatorio depende sólo de factores internos del reloj y no de como el péndulo fue puesto en movimiento. Es más, después de una pequeña perturbación, seguido de un transiente, el péndulo restablece su ritmo interno.

Estas características son típicas no solo de relojes, también de muchos sistemas oscilatorios de diversa naturaleza. En física tales osciladores son llamados osciladores auto sostenidos. Sus propiedades son las siguientes:

■ Este oscilador es un sistema activo. Contiene una fuente interna de energía que es transformada en un movimiento oscilatorio. Si es aislado,

el oscilador continua generando el mismo ritmo hasta que se agote su fuente de energía.

- La forma del oscilación está determinada por los parámetros del sistema y no depende de como el sistema fue "prendido", esto es, después de un transiente regresa a la oscilación estacionaria.
- La oscilación es estable a pequeñas perturbaciones, esto es, siendo perturbado, la oscilación regresa a su forma original.

Caracterización del ritmo: periodo y frecuencia

Los osciladores auto sostenidos pueden presentar ritmos de varias formas, desde formas simples sinusoidales, hasta una secuencia de pulsos cortos. Ahora cuantificamos ese ritmo usando el ejemplo del reloj péndulo. La oscilación del péndulo es periódica, y el periodo T es la característica principal del reloj. De hecho, el mecanismo de rotación de las manecillas cuenta el número de oscilaciones del péndulo, así es que su periodo constituye la unidad básica de tiempo. Usualmente se caracteriza el ritmo por el número de oscilaciones por unidad de tiempo, definida como la frecuencia ciclica

$$f = \frac{1}{T}. (6.1)$$

En el tratamiento teórico de la sincronización, la frecuencia angular $\omega = 2\pi f = 2\pi/T$ es a menudo más conveniente. Llamaremos a la frecuencia angular del sistema autónomo (aislado), frecuencia natural o característica.

Acoplamiento de objetos oscilantes

Ahora supongamos que tenemos dos relojes, incluso si son del mismo tipo o hechos por el mismo fabricante, el periodo de estos relojes discrepa alrededor de un diez por ciento, debido a que algunos parámetros mecánicos finos difieren. Entonces estos dos relojes muestran un diferencia pequeña en el tiempo, de tal forma que si los miramos en un instante de tiempo, estos péndulos típicamente muestran diferentes posiciones.

Supongamos que estos péndulos no idénticos no son independientes, si no que interactúan débilmente. Puede haber varias formas de interacción, o acoplamiento entre estos dos osciladores. Supóngase que estos dos relojes están fijos a un mismo soporte, que no sea una barra absolutamente rígida, entones esta barra puede doblarse, o puede vibrar muy poco, moviendo de la derecha a la izquierda, esto no importa mucho, lo que importa es que el movimiento de cada péndulo es transmitido a través de la estructura que

los soporta al otro péndulo, y como resultado los dos péndulos se "sienten": interactúan por medio de las vibraciones del soporte. Esta vibración puede ser perceptible sólo con aparatos de medición de alta precisión. Sin embargo, a pesar de su debilidad, puede alterar el ritmo de los dos relojes.

Ajuste del ritmo: enganche de frecuencia y de fase

Los experimentos muestran que incluso una interacción débil puede sincronizar dos relojes. Esto es, dos relojes no idénticos, los cuales, si se separan, tienen diferentes periodos de oscilación, cuando son acoplados, ajustan sus ritmos y empiezan a oscilar con periodo común. Este fenómeno usualmente es descrito en términos de la coincidencia de frecuencias como enganche de frecuencias. Si dos osciladores no idénticos tienen sus propias frecuencias f_1 y f_2 , y son acoplados, pueden comenzar a oscilar con una frecuencia común. Si se sincronizan o no depende de los siguientes dos factores

1. Fuerza del acoplamiento

Esto describe que tan débil (o fuerte) es la interacción. En una situación experimental no siempre es claro como medir está cantidad. En el experimento descrito anteriormente, depende de una manera complicada de la habilidad del soporte para moverse, de hecho, si la barra es totalmente rígida, entonces el movimiento del péndulo no afecta el soporte, y entonces no hay forma de que los dos relojes interactúen, la fuerza de acoplamiento es cero. Si la barra no es rígida, si no que puede vibrar o doblarse, entonces la interacción aparece.

2. Diferencia de frecuencias

La diferencia de frecuencias $\Delta f = f_1 - f_2$, cuantifica que tan diferentes son los osciladores no acoplados. En contraste con la fuerza del acoplamiento, en los experimentos la diferencia de frecuencias puede ser fácilmente medida y variada. En el caso de los relojes, las frecuencias se pueden ajustar a un valor dado cambiando la longitud del péndulo. Entonces podemos averiguar como el resultado de la interacción (esto es, si se sincronizan o no) depende de la diferencia de frecuencias. Supóngase que realizamos el siguiente experimento. Primero separamos los dos relojes (por ejemplo, poniéndolos en diferentes cuartos) y medimos sus frecuencias f_1 y f_2 . Habiendo hecho esto, ponemos a los relojes en un soporte común, y medimos sus frecuencias F_1 y F_2 del sistema acoplado. Podemos llevar acabo estas mediciones para diferentes valores de Δf , para encontrar la dependencia de ΔF con Δf . Graficando

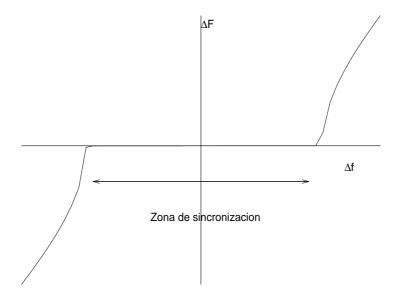


Figura 6.1: Diferencia de frecuencias con acoplamiento vs. diferencia de frecuencias naturales, a una fuerza de interacción fija. Para cierto rango de la diferencia de frecuencias naturales Δf , las diferencia de frecuencias $\Delta F = 0$, indicando sincronización

esta dependencia obtenemos una curva que se muestra en la figura 6.1, la cual es típica para osciladores interactuantes, independiente de su naturaleza (mecánica, química, eléctrica, etc.). Analizando esta curva, vemos que si la diferencia de frecuencias en el sistema sin acoplamiento no es muy grande, la frecuencias de los dos relojes es idéntica ($\Delta F = 0$) o enganchadas, esto es, la sincronización aparece. Remarcamos el hecho de que las frecuencias $f_{1,2}$ y $F_{1,2}$ deben ser medidas para los mismos objetos, pero para diferentes condiciones experimentales: $f_{1,2}$ caracterizan oscilaciones libres (sin acoplamiento), mientras que las frecuencias $F_{1,2}$ son obtenidas en presencia del acoplamiento. Generalmente esperamos que la región de sincronización crezca cuando se aumenta la fuerza de acoplamiento.

Una inspección más detallada de los estados sincronizados revela que la sincronización de dos relojes puede aparecer de diferentes formas. Puede pasar que los dos péndulos oscilen de manera similar, por ejemplo, que los dos lleguen casi simultáneamente a la esquina izquierda y que crucen casi si-

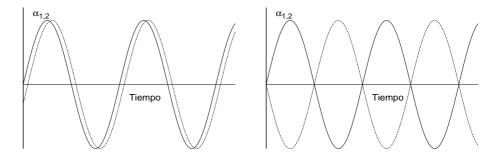


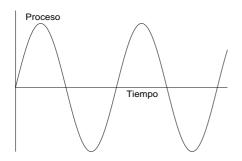
Figura 6.2: Posibles estados de sincronización de dos reloj péndulos casi idénticos, pueden estar casi sincronizados en fase $\phi_1 = \phi_2 \approx 0$, o en antifase $\phi_1 = \phi_2 \approx \pi$.

multáneamente la línea vertical. Las posiciones de los péndulos evolucionan en el tiempo como se muestra en la figura 6.2. Alternativamente, podemos encontrar que los péndulos siempre se mueven en direcciones opuestas: cuando el primer péndulo, digamos, está en el tope izquierdo de su trayectoria, y el segundo péndulo está en el tope derecho de su trayectoria; cuando cruzan la línea vertical, los péndulos se mueven en sentido opuesto. Para describir estos dos distintos comportamientos, introducimos el concepto clave de fase de un oscilador.

Entenderemos como fase a una cantidad que crece 2π con cada ciclo oscilatorio. La fase determina sin ambigüedad el estado de un oscilador periódico. En este caso la fase crece linealmente en el tiempo, ver figura 6.3 . La fase no parece dar nueva información del sistema, pero su utilidad se hace evidente cuando consideramos la diferencia de fase de los dos péndulos. Esto nos ayuda a diferenciar entre dos diferentes regimenes de sincronización.

Si los dos péndulos se mueven en la misma dirección y casi simultáneamente, entonces sus fases ϕ_1 y ϕ_2 se parecen y su estado es llamado sincronización de fase. Si miramos más de cerca las fases de los péndulos, podemos detectar que los movimientos no son exactamente simultáneos. Un reloj que inicialmente era más rápido, estará ligeramente adelantado al segundo péndulo, en ese caso hablamos de un desplazamiento de fase.

Si los dos péndulos se mueven es direcciones opuestas, el estado de sincronización se llama en *antifase*, esto es la diferencia de fase es π . Otra vez, los péndulos no están exactamente en antifase, si no que existe un desplaza-



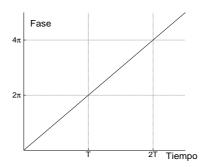


Figura 6.3: La definición de la fase. La fase de un oscilador periódico crece uniformemente en el tiempo y gana 2π cada periodo.

miento de fase entre ellos.

La relación entre las fases de dos osciladores auto sostenidos sincronizados se llama *enganche de fase*.

Este experimento pensado demuestra el sello de la sincronización, esto es, dos osciladores que inicialmente tienen diferentes frecuencias y fases propios, al ser acoplados (débilmente) ajustan sus ritmos y empiezan a oscilar con una frecuencia común, cabe destacar que la identidad de frecuencias se mantiene para un cierto rango de la diferencia de frecuencias naturales.

Como ya hemos mencionado la sincronización es debida al acoplamiento de dos osciladores autosostenidos. Se pueden distinguir dos clases principales de sincronización según su acoplamiento: acoplamiento unidireccional y acoplamiento bidireccional. En el primer caso el sistema global formado por dos subsistemas, tiene una configuración conducción-respuesta (o amo-esclavo). Esto implica que un subsistema evoluciona libremente y llevando la evolución del otro. En el segundo caso los dos subsistemas están acoplados uno al otro, este acoplamiento induce una modificación del ritmo a una sincronización común, esta situación ocurre en fisiología, entre el sistema cardiaco y el respiratorio o entre neuronas interactuantes.

En el contexto de osciladores acoplados, muchos estados sincronizados han sido estudiados, entre ellos están la sincronización completa o idéntica (CS), sincronización de fase (PS) y de retraso (LS), sincronización generalizada (GS), sincronización intermitente revestida (ILS), sincronización de fase imperfecta (IPS) y sincronización aproximada (AS) [28].

La sincronización más simple es la CS, consiste en una perfecta coinci-

dencia en las trayectorias de los dos subsistemas, llevada a cabo por una señal que los acopla, de tal manera que una sigue a la otra en el transcurso del tiempo. Este mecanismo es encontrado cuando dos sistemas idénticos son acoplados unidireccionalmente.

LA GS va más allá utilizando sistemas completamente diferentes y asociando la salida de un sistema a una función dada del otro sistema.

Osciladores diferentes acoplados o sistemas rotatorios pueden alcanzar un régimen intermedio, cuando se produce una sincronización de fase (PS), mientras que la correlación de las amplitudes permanece baja.

La LS es intermedia entre PS y GS. Implica límites asintóticos de la diferencia de la salida de un sistema al tiempo t y la salida del otro sistema a un tiempo diferente de retraso τ_{lag} . Esto implica que las dos salidas enganchan sus fases y amplitudes en un tiempo de retraso.

La ILS implica que los subsistemas en la mayor parte del tiempo están en LS, pero estallidos intermitentes en el comportamiento local pueden ocurrir, rompiendo la LS.

Análogamente la IPS ocurre cuando se rompe la PS. Finalmente la AS resulta cuando hay un límite asintótico en la diferencia entre un subconjunto de variables de un sistema y su correspondiente subconjunto de variables del otro sistema.

En este trabajo sólo abordaremos la sincronización de fase. Es importante notar que la sincronización de fase implica una sincronización de frecuencia, pero, una sincronización de frecuencia no implica una sincronización de fase.

6.1. Sincronización de un oscilador por una fuerza externa

Consideremos el caso de un oscilador autosostenible, el cual está sujeto a una fuerza externa periódica. Este esquema representa el caso de dos osciladores autosostenibles, donde el acoplamiento es unidireccional. Un ejemplo de este tipo de sistema son los relojes biológicos, el ritmo de los organismos está controlado por el ritmo de la rotación de la tierra alrededor de su eje y del sol. Definitivamente está acción es unidireccional.

6.1.1. Dinámica de la fase

Describiremos el efecto de una fuerza externa débil en un oscilador periódico autosostenido. La idea principal es que la fuerza débil sólo influye en la fase, no en la amplitud, entonces podemos describir la dinámica sólo con una ecuación para la fase.

Considere un sistema ordinario de ecuaciones diferenciales M-dimensional $(M \ge 2)$, disipativo y autónomo

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}), \qquad \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_M), \tag{6.2}$$

y supongamos que el sistema tiene una solución estable periódica (con periodo T_0) $x_0(t) = x_0(t+T_0)$. En el espacio fase (el espacio de todas las variables \mathbf{x}), esta solución es una trayectoria cerrada atractiva, llamada *ciclo límite*. Un punto moviéndose a lo largo del ciclo límite representa oscilaciones autosostenidas. El ejemplo clásico de un oscilador autosostenido es el de Van der Pol

$$\ddot{x} - 2\mu \dot{x}(1 - \beta x^2) + \omega_0^2 x = 0. \tag{6.3}$$

Introducimos la fase ϕ como una coordenada a lo largo del ciclo límite, tal que cree monotónicamente en la dirección del movimiento y gana 2π durante cada rotación. Más aún, pedimos que la fase crezca uniformemente en el tiempo tal que obedezca la ecuación

$$\frac{d\phi}{dt} = \omega_0,\tag{6.4}$$

donde $\omega_0 = 2\pi$ es la frecuencia de la oscilación autosostenida. Cuando el periodo de las oscilaciones sea influenciado (por un acoplamiento), necesitaremos referirnos a la frecuencia del oscilador aislado; por lo que llamaremos a ω_0 la frecuencia natural o característica.

De la ecuación (6.4) podemos ver una propiedad muy importante de la fase: es una variable neutral estable. Una perturbación en la fase permanece constante, esto es, no decrece ni aumenta en el tiempo. En términos de la estabilidad de la trayectoria significa que un ciclo límite tiene un exponente de Lyapunov que es cero, que corresponde a las perturbaciones alrededor del ciclo (los otros exponentes corresponden a las perturbaciones transversales y son negativos). Esto refleja la propiedad del sistema dinámico autónomo es invariante ante desplazamientos temporales: $\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}(t + \Delta t)$ es una solución también. En el ciclo límite, el desplazamiento temporal Δt es equivalente al desplazamiento de fase $\Delta \phi$.

6.1.2. Pequeñas perturbaciones e isócronas

Consideremos ahora el efecto de una fuerza externa débil periódica sobre el oscilador autosostenido. Describimos el sistema por las ecuaciones

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \varepsilon \mathbf{p}(\mathbf{x}, t), \tag{6.5}$$

donde la fuerza $\varepsilon \mathbf{p}(\mathbf{x}, t) = \varepsilon \mathbf{p}(\mathbf{x}, t + T)$ tiene periodo T, el cual es en general diferente de T_0 . La fuerza es proporcional a un parámetro pequeño ε .

La fuerza externa lleva a la trayectoria fuera del ciclo límite, pero debido a que es pequeña y el ciclo es estable, la trayectoria sólo se desvía poco de la original \mathbf{x}_0 , esto es, cae en la vecindad del ciclo límite. Entonces, las perturbaciones transversales al ciclo límite son pequeñas. Este esquema cualitativo sugiere una descripción de la dinámica perturbada solamente con la fase. Para esto debemos introducir la fase de un sistema autónomo no sólo sobre el ciclo límite, si no también en la vecindad.

La idea clave es definir la fase de tal forma que rote uniformemente de acuerdo con la ecuación (6.4) no sólo en el ciclo, si no también en su vecindad. Para lograr esto definimos las llamadas *isócronas*. Observemos al sistema (6.2) estroboscópicamente con el intervalo de tiempo exactamente igual al periodo del ciclo límite T_0 . De esta manera obtenemos de (6.2) un mapeo

$$\mathbf{x}(t) \to \mathbf{x}(t + T_0) \equiv \Phi(\mathbf{x}).$$

Este mapeo tiene a todos los puntos del ciclo límite como puntos fijos, y todos los puntos de la vecindad son atraídos a él. Escojamos un punto \mathbf{x}^* en el ciclo y consideremos todos los puntos de la vecindad que son atraídos a \mathbf{x}^* bajo la acción de $\Phi(\mathbf{x})$. Estos forman una hipersuperficie I de dimensión (M-1), llamada $is\acute{o}crona$, que cruza el ciclo límite en \mathbf{x}^* . Una hipersuperficie puede ser dibujada para cada punto en el ciclo límite. A partir de esto, podemos parametrizar todas las hipersuperficies con la fase ϕ . Ahora extendemos la definición de fase para puntos de la vecindad del ciclo límite, demandando que la fase sea constante para cada isócrona $I(\phi)$. De esta forma definimos la fase en la vecindad del ciclo límite, o al menos donde la isócrona existe.

6.1.3. La ecuación para la dinámica de la fase

Habiendo definido la fase en la vecindad del ciclo límite, podemos escribir la ecuación para la fase en la vecindad como

$$\frac{d\phi(\mathbf{x})}{dt} = \omega_0. \tag{6.6}$$

Como la fase es una función suave de las coordenadas, podemos escribir su derivada temporal como (regla de la cadena)

$$\frac{d\phi(\mathbf{x})}{dt} = \sum_{k} \frac{\partial\phi}{\partial x_k} \frac{dx_k}{dt}.$$
 (6.7)

La cual da junto con la ecuación (6.2), la relación

$$\sum_{k} \frac{\partial \phi}{\partial x_k} f_k(\mathbf{x}) = \omega_0.$$

Consideremos ahora el sistema perturbado (6.5). Usando la definición de fase para el sistema sin perturbar y substituyendo (6.5) en (6.7) obtenemos

$$\frac{d\phi(\mathbf{x})}{dt} = \sum_{k} \frac{\partial\phi}{\partial x_{k}} (f_{k}(\mathbf{x}) + \varepsilon p_{k}(\mathbf{x}, t)) = \omega_{0} + \varepsilon \sum_{k} \frac{\partial\phi(\mathbf{x})}{\partial x_{k}} p_{k}(\mathbf{x}, t)).$$

El segundo término de lado derecho es pequeño (proporcional a ε), y las desviaciones de \mathbf{x} del ciclo límite $\mathbf{x_0}$ son pequeñas también. Entonces, en primera aproximación podemos despreciar estas desviaciones y calcular el lado derecho en el ciclo límite:

$$\frac{d\phi(\mathbf{x})}{dt} = \omega_0 + \varepsilon \sum_k \frac{\partial \phi(\mathbf{x_0})}{\partial x_k} p_k(\mathbf{x_0}, t).$$
 (6.8)

Debido a que los puntos en el ciclo límite tiene correspondencia uno a uno con la fase ϕ , obtenemos una ecuación cerrada para la fase

$$\frac{d\phi(\mathbf{x})}{dt} = \omega_0 + \varepsilon Q(\phi, t), \tag{6.9}$$

donde

$$Q(\phi, t) = \sum_{k} \frac{\partial \phi(\mathbf{x_0}(\phi))}{\partial x_k} p_k(\mathbf{x_0}(\phi), t).$$

Q es una función de periodo 2π en ϕ y de periodo T en t.

6.1.4. Dinámica lenta de la fase

En la aproximación de orden cero", cuando despreciamos el efecto de la fuerza externa ($\varepsilon = 0$), la ecuación (6.9) tiene la solución

$$\phi = \omega_0 t + \phi_0. \tag{6.10}$$

Sustituyendo esta solución en la función Q. Como Q es una función de periodo 2π en ϕ y T periódica en t, podemos representarla como una doble serie de Fourier

$$Q(\phi, t) = \sum_{l,k} a_{l,k} e^{ik\phi + il\omega t}, \qquad (6.11)$$

donde $\omega = 2\pi/T$ es la frecuencia de la fuerza externa. Substituyendo (6.10) en (6.11)

$$Q(\phi, t) = \sum_{l,k} a_{l,k} e^{ik\phi_0} e^{(ik\omega_0 + il\omega)t}.$$
 (6.12)

Observamos que la función Q contiene términos oscilantes rápidos (comparados con la escala de tiempo $1/\varepsilon$), como también términos que varían lentamente. Estos términos satisfacen la condición de resonancia

$$k\omega_0 + l\omega \approx 0. ag{6.13}$$

Sustituyendo en (6.9), los términos resonantes en la suma (6.12) son los más importantes para la dinámica. Entonces, para mantener sólo la dinámica esencial, promediamos la fuerza (6.12) dejando solamente los términos resonantes. Los términos resonantes dependen del la relación entre la frecuencia externa ω y la frecuencia natural ω_0 . El caso más simple es cuando son casi iguales $\omega \approx \omega_0$. Entonces, sólo los términos con k=-l son resonantes. La suma de estos términos da una nueva fuerza promedio

$$\sum_{k=-l} a_{l,k} e^{ik\phi + il\omega t} = \sum_{k} a_{-k,k} e^{ik(\phi - \omega t)} = q(\phi - \omega t). \tag{6.14}$$

La fuerza promedio q es una función de periodo 2π y contiene todos los términos resonantes. Substituyendo en (6.9) obtenemos

$$\frac{d\phi}{dt} = \omega_0 + \varepsilon q(\phi - \omega t). \tag{6.15}$$

Ahora definimos una nueva variable, la diferencia de fase entre la fase del oscilador y la fase de la fuerza externa

$$\psi = \phi - \omega t. \tag{6.16}$$

También introducimos la diferencia de fase como

$$\nu = \omega - \omega_0, \tag{6.17}$$

para obtener finalmente

$$\frac{d\psi}{dt} = -\nu + \varepsilon q(\psi). \tag{6.18}$$

La condición de resonancia puede tomar una forma más general

$$\omega \approx \frac{m}{n}\omega_0,\tag{6.19}$$

donde n,m son enteros sin un común divisor. Esta condición de resonancia lleva a una ecuación de la forma (6.18), con $\psi = m\phi - m\omega t$ y $\nu = n\omega - m\omega_0$. La función de periodo 2π más simple es la función seno, entonces la forma más simple de la ecuación de la fase promedio es

$$\frac{d\psi}{dt} = -\nu + \varepsilon \sin(\psi). \tag{6.20}$$

Usualmente llamada ecuación de Adler.

6.1.5. Enganche de fase y región de sincronización

Consideremos las soluciones de la ecuación (6.18), la cual es una ecuación diferencial ordinaria de primer orden no lineal. Hay dos formas de introducir el espacio fase: la fase ψ puede variar ya sea de $-\infty$ a ∞ (esquema extendido), o usando la periodicidad de la función q, podemos tomar el círculo $0 \le \psi < 2\pi$ como el espacio fase (esquema reducido). La ecuación (6.18) depende de dos parámetros, de acuerdo a la ecuación inicial (6.5), ε puede ser interpretado como la amplitud de la fuerza externa. El parámetro ν de acuerdo con (6.17), es la diferencia de fase entre la fase natural y la fase de la fuerza externa.

De acuerdo a la ecuación (6.18), existen dos casos en la dinámica de la fase ψ , como se muestra en la figura 6.4. La función $q(\psi)$ es una función de ψ con periodo 2π y por tanto tiene en el intervalo $[0, 2\pi)$ un máximo q_{max} y un mínimo q_{min} ; típicamente estos dos extremos no son degenerados. Entonces, si la diferencia de frecuencias ν está en el intervalo

$$\varepsilon q_{min} < \nu < \varepsilon q_{max},$$
 (6.21)

entonces hay al menos un par de puntos fijos de la ecuación (6.18), esto es, un par de soluciones estacionarias para ψ . Uno de estos puntos es estable y

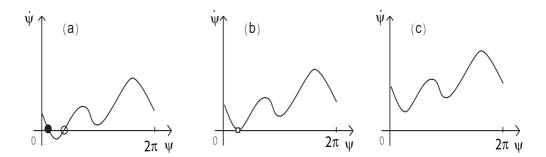


Figura 6.4: El lado derecho de la ecuación (6.18), (a)adentro, (b) en el borde y (c) afuera de la región de sincronización. Los puntos estable e inestables se muestran con círculos llenos y vacíos. En (b) se muestra la transición de la sincronización, aquí, los puntos estables e inestables colisionan para formar un punto semiestable(caja).

el otro inestable; generalmente puede haber varios pares de puntos estable-inestable si la función q tiene más de dos valores extremos. Entonces si (6.21) se satisface, el sistema evolucionara a uno de los puntos estables y permanecerá ahí, de tal forma que la fase ψ es constante. Para la fase ϕ esto significa una rotación constante con la frecuencia de la fuerza constante:

$$\phi = \omega t + \psi_s, \tag{6.22}$$

y este es el régimen de sincronización o lengua de Arnold. Este régimen existe adentro del dominio (6.21), en el plano de parámetros (ν, ε) . Usualmente se dice que la fase del oscilador está enganchada por la fase de la fuerza externa ωt , y este régimen es llamado enganche de fase, lo cual significa que la fase del oscilador coincide con la fase de la fuerza externa.

Otra situación se observa si la diferencia de frecuencias ν cae fuera del rango (6.21). Entonces la derivada de la fase ψ es permanente positiva (o negativa) y la frecuencia de oscilación difiere de la frecuencia de la fuerza externa ω . La solución de (6.18) puede ser escrita formalmente en cuadraturas como

$$\int^{\psi} \frac{d\psi}{\varepsilon q(\psi) - \nu} = t, \tag{6.23}$$

la cual define la fase lenta ψ en función del tiempo $\psi = \psi(t)$. Esta función

tiene periodo T_{ψ} definido por la ecuación

$$T_{\psi} = \left| \int_{0}^{2\pi} \frac{d\psi}{\varepsilon q(\psi) - \nu} \right|. \tag{6.24}$$

La fase ϕ rota de forma no uniforme,

$$\phi = \omega t + \psi(t). \tag{6.25}$$

Una característica importante de la dinámica fuera de la región de sincronización es la velocidad promedio de la rotación de l fase, llamada frecuencia observada. Cuando la fase ψ gana $\pm 2\pi$ durante el tiempo T_{ψ} , la frecuencia promedio de las rotaciones de la fase lenta ψ es

$$\Omega_{\psi} = 2\pi \left(\int_0^{2\pi} \frac{d\psi}{\varepsilon q(\psi) - \nu} \right)^{-1}. \tag{6.26}$$

La frecuencia observada Ω de la fase original ϕ es

$$\langle \dot{\phi} \rangle = \Omega = \omega + \Omega_{\psi}. \tag{6.27}$$

Podemos ver que la frecuencia Ω_{ψ} depende monotónicamente de la diferencias de frecuencias ν . Más aún, en la vecindad de la región de transición podemos estimar su dependencia analíticamente. Cuando el parámetro ν cambia hasta la región de sincronización en $\nu = \varepsilon q_{max}$, donde los puntos fijos estable e inestable se colapsan y desaparecen en a través de una bifurcación sillanodo. Consideremos la transición en $\nu_{max} = \varepsilon q_{max}$. si $\nu - \nu_{max}$ es pequeña, la expresión $|\varepsilon q(\psi) - \nu|$ es muy pequeña en la vecindad del punto ψ_{max} , entonces esta vecindad domina la integral (6.26). Desarrollando la función $q(\psi)$ en serie de Taylor en ψ_{max} y poniendo los límites de integración a infinito nos lleva a un comportamiento de una raíz cuadrada

$$|\Omega_{\psi}| \approx 2\pi \left| \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\psi}{\frac{1}{2} \varepsilon q''(\psi_{max}) \psi^{2} - (\nu - \nu_{max})} \right|^{-1}$$

$$= \sqrt{\varepsilon |q''(\psi_{max})| \cdot (\nu - \nu_{max})} \sim \sqrt{\nu - \nu_{max}}. \tag{6.28}$$

Mostramos una dependencia típica de Ω_{ψ} contra la diferencia de frecuencias ν en la figura 6.5.

Cabe mencionar que la dinámica en la vecindad del punto de transición de la fase ψ es altamente no uniforme en el tiempo (ver figura 6.6). De hecho,

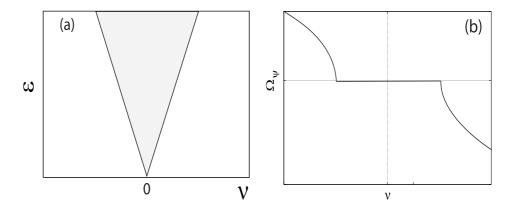


Figura 6.5: (a) Región de sincronización en el espacio de parámetros ν, ϵ . (b) Dependencia de la frecuencia observada contra la diferencia de frecuencias ν , para un valor fijo de ϵ .

cerca de la bifurcación la trayectoria gasta un tiempo grande (proporcional a $(\nu - \nu_{max}^{-1/2})$) en la vecindad de ψ_{max} , el lado derecho de (6.18) es casi cero. Estos tiempos de fase casi constante $\psi \approx \psi_{max}$ se entremezclan regularmente en intervalos donde la fase ψ se incrementa (o decrece) por 2π ; estos eventos son llamados resbalones de fase. La rotación de la fase entonces puede representarse como una secuencia periódica (de periodo T_{ψ}) de resbalones de fase. Entre estos resbalones de fase, el oscilador está casi enganchado a la fase de la fuerza externa. Durante el resbalón la fase realiza una rotación más (o una menos) con respecto a la de la fuerza externa.

Rotores forzados como osciladores autosostenidos

En este capítulo hemos considerado oscilaciones autosostenidas, y el efecto de una fuerza externa sobre estas. Los osciladores autosostenidos tienen una frecuencia característica fija y están oscilando desde antes de interactuar con cualquier fuerza externa.

Los rotores son osciladores que si los forzamos con una fuerza externa constante, empiezan a oscilar a una frecuencia fija (dependiente de la fuerza constante). A primera vista, los rotores forzados no pertenecen a los osciladores autosostenidos, debido a que necesitan una fuerza constante para oscilar. Sin embargo, estos tienen la misma las mismas propiedades de un oscilador autosostenido: en el espacio fase hay un ciclo límite y uno de los exponentes de Lyapunov es cero [12]. Entonces las rotaciones forzadas son similares a las oscilaciones autosostenidas: pueden ser sincronizadas por una fuerza externa

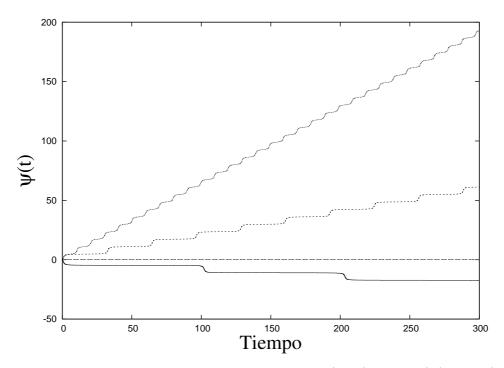


Figura 6.6: LA dinámica de la fase descrita por (6.18), para $q(\psi) = \sin(\psi)$, $\epsilon = 1$ y diferentes valores de la diferencia de frecuencias ν : de abajo hacia arriba $\nu = 1.001, 0.0, -1.01, 1.1$.

periódica [65].

6.2. Sincronización de frecuencia y fase en sistemas estocásticos

Esta sección está basada en el artículo [66]. El estudio de la sincronización en sistemas estocásticos necesita una revisión de los conceptos fundamentales. Es obvio que cuando estamos hablando de un sistema estocástico, este se
refiere a la existencia de un ruido, por ejemplo ruido blanco. Cuando consideramos el fenómeno de enganche de fases, el ruido va a prohibir la existencia
estricta de un límite para las diferencia de fase de dos sistemas. Sin embargo, la reformulación del fenómeno de sincronización en presencia de ruido es
posible calculando el promedio de la duración de los episodios de enganche

 $\langle T_{eng} \rangle$. En el caso de que $\langle T_{eng} \rangle \gg T_0$, donde T_0 es un tiempo característico de la dinámica, por ejemplo, el periodo de una fuerza externa o el inverso de una frecuencia intrínseca natural del sistema, en este caso es justificado hablar de sincronización efectiva.

Dado un conjunto de datos o alguna dinámica, existe una variedad de métodos para definir la fase instantánea $\phi(t)$ de una señal o una dinámica.

6.2.1. Fase lineal interpolada ϕ^L

Podemos utilizar cualquier punto de cruce como referencia para decir que un ciclo es completado. Sin embargo toda la dinámica debe ser conocida en detalle. En muchos casos no tenemos acceso a todos los datos sobre la dinámica, si no a una serie de datos que muestran una repetición de un evento característico, como por ejemplo, los picos pronunciados de la actividad neural, los picos de un electrocardiograma, o los máximos pronunciados en la dinámica de poblaciones. Estos eventos pueden servir como marca cuando un ciclo k (o medio ciclo) es completado, y comienza otro ciclo k+1. Entonces es posible definir una fase instantánea $\phi^L(t)$ por interpolación lineal, esto es

$$\phi^{L}(t) = \frac{t - t_k}{t_{k+1} - t_k} 2\pi + k2\pi, \qquad t_k \le t < t_{k+1}, \tag{6.29}$$

donde los tiempos t_k están fijados por los eventos marca. Cabe notar que en general se supone que tenemos una gran colección de datos $(k \to \infty)$.

También cabe notar (a partir de la definición) que, cuando ocurre un evento la fase aumenta por 2π (o $\pi/2$ si es la mitad del ciclo) con respecto a la fase del evento anterior. Otra propiedad importante es que cuando la serie de tiempo representa un oscilador con una frecuencia fija (oscilador armónico) la definición de fase lineal coincide con la fase del oscilador armónico $\phi^L(t) = \phi(t) = \omega_a t$, donde $\omega_a = 2\pi/T$, con T siendo el tiempo entre dos eventos (periodo).

Estamos interesados en calcular la frecuencia de nuestro sistema, definida como la derivada temporal de la fase lineal $\phi^L(t)$. Como la fase es lineal a trozos, su derivada es discontinua, y es constante en cada intervalo $[t_k, t_{k+1})$. Podemos representar una función constante en un intervalo con ayuda de la función escalón $\Theta(x)$

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & x \ge 0, \\ 0 & x < 0, \end{cases}$$

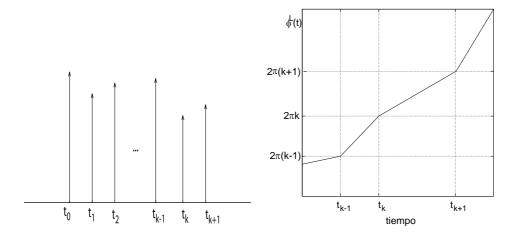


Figura 6.7: En la primera figura se muestra un ejemplo de una serie de tiempos tomados en un evento que sirve como marca para completar un ciclo. En la siguiente figura se muestra como crece la fase 2π veces por cada evento

con esto una función que tiene un valor constante de f_0 , en el intervalo [a,b] se puede escribir como $f(x) = \Theta(x-1) - \Theta(x-b)$.

Por lo tanto, la frecuencia al tiempo t se puede escribir como una suma de funciones constantes en el intervalo $[t_k, t_{k-1})$, esto es

$$\omega(t) = \sum_{k=0}^{N-1} \frac{2\pi}{t_{k+1} - t_k} [\Theta(t - t_k) - \Theta(t - t_{k+1})], \tag{6.30}$$

donde N es el número de eventos ocurridos al tiempo t_N . Obviamente el valor de ω depende del tiempo, por lo que podemos definir su promedio temporal como

$$\langle \omega \rangle = \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \omega(t) dt.$$
 (6.31)

Hay dos formas de realizar esta integral, la más fácil es notar que la frecuencia esta definida como la derivada temporal de la fase $\omega(t) = \dot{\phi}(t)$, entonces

$$\int_0^T \omega(t)dt = \int_0^T \frac{d\phi^L}{dt}dt = \phi^L(T) - \phi^L(0).$$

Debido a la definición de $\phi^L(t)$, tenemos un conjunto de tiempos $\{t_k\}$, por lo

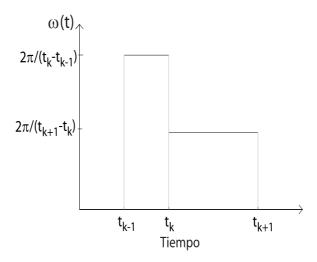


Figura 6.8: La frecuencia (6.30) definida como la derivada de la fase.

que en el límite en (6.31), se puede remplazar por un límite en k.

$$\langle \omega \rangle = \lim_{T \to \infty} \frac{\phi^L(T) - \phi^L(0)}{T} = \lim_{k \to \infty} \frac{\phi^L(t_k) - \phi^L(0)}{t_k}, \tag{6.32}$$

podemos tomar sin perdida de generalidad que $\phi(0) = 0$, por la definición de la fase (6.29), tenemos que $\phi(t_k) = k2\pi$, por lo tanto el promedio lo podemos escribir como

$$\langle \omega \rangle = \lim_{k \to \infty} 2\pi \frac{k}{t_k}.$$
 (6.33)

En la práctica el límite hacia infinito no se puede alcanzar, por lo que quitaremos la parte del límite, sobrentendiendo que cuando nos refiramos a promedios temporales, t_k es un tiempo muy grande comparando con tiempos característicos de la dinámica del sistema.

$$\langle \omega \rangle = 2\pi \frac{k}{t_L}.\tag{6.34}$$

Otra forma de obtener (6.33), es integrando directamente (6.30)

$$\int_0^T \omega(t)dt = \sum_{k=0}^{N-1} \frac{2\pi}{t_{k+1} - t_k} \int_0^T [\Theta(t - t_k) - \Theta(t - t_{k+1})]dt,$$

$$= \sum_{k=0}^{N-1} \frac{2\pi}{t_{k+1} - t_k} (t_{k+1} - t_k),$$

= $2\pi N$,

donde N es el numero de elementos en $\{t_k\}$ para el tiempo T ($t_N \leq T$). Por lo que sustituyendo en (6.31) y sustituyendo el límite sobre T por un límite sobre k, llegamos a (6.33)

Otra propiedad de la definición de $\phi^L(t)$ es que la frecuencia asociada al promedio aritmético del tiempo entre eventos es igual al promedio temporal de la frecuencia $\omega(t) = \dot{\phi}(t)$. En efecto, el tiempo entre el evento k y k+1 es $\tau_k = t_{k+1} - t_k$ y el promedio aritmético de τ_k es sumar sobre todos los eventos y dividir entre el número de eventos totales, esto es

$$\langle \tau \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \tau_k = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} (t_{k-1} - t_k),$$

pero la suma de todos los tiempos τ_k es igual al tiempo total t_N , por lo que

$$\langle \tau \rangle = \frac{t_N}{N}.$$

La frecuencia asociada al tiempo promedio entre eventos es

$$\langle \omega \rangle = \frac{2\pi}{\langle \tau \rangle} = 2\pi \frac{k}{t_k},$$
 (6.35)

la cual corresponde con (6.34) para k muy grandes. Entonces la fase $\phi^L(t)$ nos sirve para definir la frecuencia promedio asociada al tiempo promedio entre eventos . Más adelante podremos relacionar este tiempo con el tiempo promedio de primer paso cuando estemos tratando sistemas estocásticos visto anteriormente.

6.3. Fase discreta ϕ^D y fase de Hilbert ϕ^H

Existen otras opciones para definir una fase de un proceso irregular, por ejemplo la fase discreta ϕ^D . Su definición es similar a la de la fase lineal ϕ^L , la diferencia radica en que al lugar de crecer linealmente en el tiempo en el intervalo (t_{k-1}, t_k) , se mantiene constante y crece 2π cada vez que ocurre un evento, esto es, crece discontinuamente en el tiempo

$$\phi^D(t) = 2\pi k(t),\tag{6.36}$$

donde k(t) es el número de eventos ocurridos al tiempo t. Esta descripción es muy usual cuando se quieren hace cálculos teóricos en procesos dicótomos, ya que se ajusta a la teoría de renovaciones [67].

Otra opción es la fase de Hilbert ϕ^H , utilizada en procesamiento de señales llamada también señal analítica. Este concepto basado en la transformada de Hilbert da sin ambigüedad la fase instantánea y la amplitud para una señal arbitraria s(t) vía la construcción de la señal analítica $\zeta(t)$, la cual es una función compleja del tiempo definida como

$$\zeta(t) = s(t) + is^{H}(t) = A(t) \exp^{i\phi^{H}(t)}.$$
 (6.37)

Aquí la función $s^{H}(t)$ es la transformada de Hilbert de s(t)

$$s^{H}(t) = \pi^{-1} \text{P.V.} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{s(\tau)}{t - \tau} d\tau, \qquad (6.38)$$

donde P.V. significa que la integral es tomada en el sentido del valor principal de Cauchy. Enfatizamos que la transformada de Hilbert es libre de parámetros y que el cálculo de la fase instantánea requiere el conocimiento de todo el proceso en el tiempo.

El hecho de que la fase

$$\phi^H(t) = \arctan\left[\frac{s^H(t)}{s(t)}\right],$$
(6.39)

sea obtenida como el resultado de la convolución de las funciones s(t) y $1/\pi t$, al lugar de la diferenciación, hace que esta sea menos sensitiva a pequeñas fluctuaciones de corta duración, actuando como un filtro sobre la dinámica.

En el artículo [66], se muestra que para un proceso dicótomo, la fase lineal, discreta y de Hilbert coinciden bajo cierto rango en describir el proceso.

Por la facilidad de cálculo e interpretación, así como sus propiedades en relacionar una frecuencia a el tiempo promedio entre eventos, utilizaremos en este trabajo la fase lineal $\phi^L(t)$ para describir los procesos relacionados con sincronización, por lo que en lo posterior quitaremos el subíndice L a la fase para representarla sólo como $\phi(t)$.

Capítulo 7

Sincronización del ratchet Sobreamortiguado

En el capítulo 5 hablamos del efecto ratchet y de la necesidad de llevar al sistema fuera del equilibrio con una fuerza externa estocástica o determinista para obtener este efecto. Sin embargo ha habido interés en investigar las propiedades de transporte en ratchets deterministas [18, 19, 20, 21, 22, 24, 25, 68], es decir ratchet en ausencia de ruido. Cabe mencionar que la dinámica de potenciales inclinados ha sido estudiada en distintos contextos físicos, como: potenciales ópticos [69], conductores superiónicos [13], sistemas excitables [70], difusión en superficies [71, 72, 73, 74, 75, 76], ondas de densidad cargadas [77] y uniones Josephson [13, 11, 12]. Cuando el potencial ratchet inclinado es forzado periódicamente, exhibe una gran variedad de fenómenos físicos, incluyendo enganche de fase, histéresis [78] y caos [79].

Primero nos enfocaremos a la dinámica determinista sobreamortiguada del potencial ratchet inclinado y veremos la sincronización de este sistema cuando es forzado por una fuerza periódica externa. Para ello, vamos a definir una fase asociada a la dinámica del ratchet basados en las ideas de la sección 6.2 (ver [80]).

7.1. Definición de la fase

Definamos los tiempos $\{t_k\}$ como el conjunto de tiempos cuando la partícula llega a la posiciones discretas $x_k = \pm k$, las cuales corresponden a los mínimos del potencial sin inclinación (ver fig. 7.1), donde k toma valo-

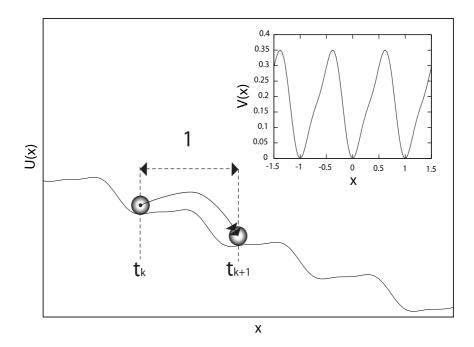


Figura 7.1: Potencial ratchet inclinado mostrando la dinámica que define los eventos a los tiempos $\{t_k\}$. El potencial ratchet sin inclinación se muestra en el cuadro superior de la figura.

res enteros no negativos $(k = 0, 1, 2, \ldots)$.

Además de los tiempos discretos, definamos las variables discretas N_k^R y $N_k^L\colon$

- \bullet N_k^R número de pozos avanzados hacia la derecha al tiempo $t_k.$
- N_k^L número de pozos retrocedidos hacia la izquierda al tiempo t_k .

Se considera que la partícula avanzo o retrocedió un pozo si estando en el pozo x = k al tiempo t_k , llega al pozo x = k+1 (avanzar) o al x = k-1 (retroceder) al tiempo t_{k+1} . El evento de avanzar o retroceder un pozo será nuestro evento marca.

Es conveniente definir otras dos variables que están relacionadas con las cantidades promedio de interés: la frecuencia y la velocidad promedio. Estas variables son

$$N_k^T = N_k^R + N_k^L = k,$$

 $N_k = N_k^R - N_k^L.$ (7.1)

 $N_k^T=k$ nos dice cuantos saltos o eventos han ocurrido al tiempo t_k y N_k nos dice el número del pozo en el que se encuentra la partícula al tiempo t_k . Cabe mencionar que esta representación discreta de la dinámica filtra información, de tal forma que se obtiene la dinámica entre pozos (dinámica lenta) y se elimina la dinámica intrapozos (dinámica rápida).

Podemos expresar la fase lineal interpolada como

$$\phi(t) = 2\pi \frac{t - t_k}{t_{k+1} - t_k} + 2\pi k, \qquad t_k < t \le t_{k+1}.$$
 (7.2)

La frecuencia es la derivada temporal de la fase $\phi(t)$, dada por la ecuación (6.30), y su promedio temporal está dado por la ecuación (6.34)

$$\langle \omega \rangle = 2\pi \frac{k}{t_{\nu}},\tag{7.3}$$

donde k es un número muy grande, de tal forma que t_k sea muy grande con respecto a un tiempo característico de la dinámica, usualmente el periodo de la fuerza externa periódica T_D .

También estamos interesados en calcular el promedio temporal de la velocidad

$$\langle v \rangle = \lim_{T \to \infty} \int_0^T v(t)dt = \lim_{T \to \infty} \frac{x(T)}{T}.$$
 (7.4)

o términos del proceso discreto N_k

$$\langle v \rangle = \frac{N_k}{t_k}.\tag{7.5}$$

Cabe recalcar que la posición y el tiempo son cantidades adimensionales (con dimensiones $x(t_k) = LN_k$) y $t_k \gg T_D$.

Hasta ahora no hemos metido los detalles de la dinámica (si es sobreamortiguada, inercial o estocástica). Por lo que la definición de fase es muy general y sirve para cualquier sistema donde se puedan definir el conjunto $\{t_k\}$. Por lo tanto, esta definición de fase se va a utilizar en los siguientes capítulos cuando abordemos el caso sobreamortiguado, inercial, estocástico e incluso cuando tengamos dos o más partículas (definiendo un conjunto de tiempos para cada partícula).

7.2. Ratchet sobreamortiguado

Para empezar consideremos la dinámica sobreamortiguada (5.15) para el caso determinista (D=0), esto es, una partícula en una dimensión gobernada por la ecuación de movimiento adimensional (con L y γ^{-1} como la distancia y el tiempo característico)

$$\dot{x} + \frac{d}{dx}V(x) = F + F_D\cos(\omega_D t), \tag{7.6}$$

donde V(x) es el potencial periódico y asimétrico ratchet, F es una fuerza constante, F_D y ω_D son la amplitud y la frecuencia de la fuerza externa periódica respectivamente. El potencial periódico y asimétrico ratchet V(x) está dado por

$$V(x) = -V_0 \left[\sin(2\pi(x - x_0)) + \frac{1}{4}\sin(4\pi(x - x_0)) - C \right], \tag{7.7}$$

donde $x_0 \simeq -0.19$ y $C = -\sin(2\pi(x_0)) - \frac{1}{4}\sin(4\pi(x_0)) \simeq 1.1$, son dos constantes tal que el mínimo del potencial está en el origen.

Podemos rescribir la ecuación de movimiento (7.6) como

$$\dot{x} + \frac{\partial}{\partial x}U(x,t) = 0, \tag{7.8}$$

donde U(x,t) es el potencial efectivo

$$U(x,t) = V(x) + x(F + F_D \cos(\omega_D t)). \tag{7.9}$$

Para $F_D = 0$ el potencial se llama "ratchet inclinado" o "potencial de lavadero", para F = 0 el potencial se llama "ratchet mecido" (del ingles rocking ratchet), cuando los dos términos son diferentes de cero decimos que es un "ratchet mecido e inclinado".

7.2.1. Resultados numéricos

Los resultados de esta sección fueron obtenidos resolviendo numéricamente la ecuación de movimiento (7.6). Usamos el algoritmo de Runge-Kutta de cuarto orden y con la condición inicial de que al tiempo t=0 la partícula está en x=0. Una vez obtenida la trayectoria completa, identificamos el conjunto de tiempos $\{t_k\}$ cuando la partícula cruza la posición $x=N_k$. Con estos eventos marca calculamos directamente la frecuencia promedio usando (7.3), y después de calcular N_k , obtenemos la corriente usando (7.5). En todo este trabajo fijamos la amplitud del potencial ratchet a $V_0=1/2\pi$.

Ratchet inclinado como un rotor

Consideremos la dinámica del ratchet inclinado $(F_D = 0)$

$$\dot{x} + \frac{d}{dx}V(x) = F, (7.10)$$

donde V(x) es el potencial ratchet (7.7) y F es una fuerza constante.

La ecuación de movimiento se puede escribir como $\dot{x} + dU(x)/dx = 0$, donde U(x) = V(x) - Fx es el potencial efectivo, que se muestra en la figura 7.1 como el potencial ratchet inclinado.

En la figura 7.2, se muestran la frecuencia y velocidad promedio, calculadas a partir de (7.3) y (7.5) respectivamente para el ratchet inclinado (7.10). Podemos ver que existen 2 umbrales para los cuales la velocidad y la frecuencia promedio es diferente de cero, esto es, dos inclinaciones críticas $F_c^L = -3/2$ y $F_c^R = 3/4$. Para valores mayores que la inclinación crítica la velocidad y la frecuencia son diferentes de cero. La velocidad crece monotónicamente con F y en la misma dirección mientras que la frecuencia siempre es positiva. Las gráficas no están centradas en el origen debido a la asimetría del ratchet. Para una F fija mayor que F_C^R , digamos F=1, la partícula recorre cada periodo del ratchet en un tiempo constante τ_0 , al cual le corresponde una frecuencia "característica" $\omega_0=2\pi/\tau_0\simeq 3.4131$. En este sentido el rotor forzado con una fuerza constante F se comporta como un oscilador autosostenido, en el sentido de que comparten las mismas propiedades: tienen un periodo bien definido, y en su espacio fase existe un ciclo límite. Entones, el rotor al igual que un oscilador auto-sostenido puede ser sincronizado con una fuerza externa periódica.

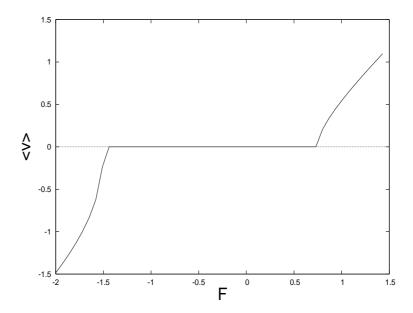


Figura 7.2: Frecuencia y velocidad promedio en función de la fuerza constante F, para el rotor (7.10)

Sincronización con una fuerza externa periódica

Como ya hemos visto en el capítulo 6, podemos hablar de sincronización si tenemos a dos osciladores autosostenidos (cada uno con una frecuencia característica bien definida) interactuando. En nuestro caso un oscilador es la fuerza externa periódica $F_D(t)$ y el otro oscilador es el ratchet inclinado. Por lo tanto, la dinámica del sistema está gobernada por

$$\dot{x} + \frac{d}{dx}V(x) = F + F_D\cos(\omega_D t), \tag{7.11}$$

donde F_D y ω_D son la amplitud y la frecuencia de la fuerza externa respectivamente.

En la figura (7.3) se muestra la velocidad promedio escalada con la frecuencia de forzamiento, $2\pi \langle v \rangle / \omega_D$ como función de F, la línea punteada indica el caso sin forzamiento $F_D=0$, previamente mostrado (figura 7.2), en comparación con el caso con forzamiento $F_D=0,5$. Cuando está presente el forzamiento periódico la corriente normalizada muestra claramente escalones con valores dados por p/q, donde p y q son números enteros. En muchos

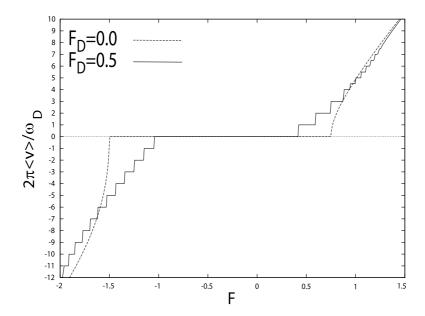


Figura 7.3: velocidad promedio en función de la fuerza constante F, la línea punteada muestra el caso cuando la fuerza periódica está ausente ($F_D = 0$) y la línea constante muestra el caso cuando la fuerza periódica está actuando sobre la partícula con amplitud $F_D = 0.5$, en ambos casos la frecuencia de forzamiento es $\omega_D = 0.7$

casos q=1 y la corriente promedio normalizada es un entero. En el contexto de uniones Josephson, estos son los escalones de Shapiro [79]. También cabe notar que los umbrales de la inclinación F para una corriente diferente de cero se recorrieron con respecto al ratchet inclinado. Ahora se necesita una inclinación menor para que existan saltos.

En la figura 7.4 mostramos la frecuencia promedio escalonada con la frecuencia de forzamiento ω_D , al igual que la figura anterior podemos ver el enganche de las frecuencias cuando la fuerza externa periódica es diferente de cero F_D =0.5, y la línea punteada nos muestra el caso sin forzamiento externo periódico F_D = 0. Al igual que la corriente, la frecuencia promedio se escala con la frecuencia de forzamiento ω_D , esto es, $<\omega>/\omega_D=p/q$, donde p y q son enteros. Aun que en esta figura queda patente un enganche de frecuencias, no queda claro cuál es el papel de la frecuencia característica ω_0 , ya que el parámetro que estamos variando es precisamente la inclinación

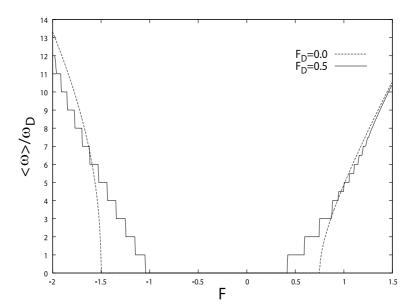


Figura 7.4: Frecuencia promedio en función de la fuerza constante F, la línea punteada muestra el caso cuando la fuerza periódica está ausente ($F_D = 0$) y la línea constante muestra el caso cuando la fuerza periódica está actuando sobre la partícula con amplitud $F_D = 0.5$, en ambos casos la frecuencia de forzamiento es $\omega_D = 0.7$.

F que define la ω_0 , e incluso existe un rango de la inclinación F, donde hay enganches de frecuencia para $F_D \neq 0$ y para ese mismo valor de la inclinación F, no está definida la frecuencia característica ω_0 del ratchet inclinado, la cual, es una condición necesaria para la existencia de sincronización. Para evitar esto, en los siguientes cálculos mantendremos fija la inclinación F=1, la cual le corresponde una frecuencia característica $\omega_0 \simeq 3.41$. De esta manera tenemos los ingrediente básicos para poder hablar de sincronización del ratchet inclinado con la fuerza periódica.

En la figura 7.5 mostramos la velocidad promedio escalada $2\pi \langle v \rangle / \omega_D$ en función de la amplitud de la fuerza externa periódica F_D . En (a) la línea punteada nos muestra el caso sin inclinación F=0, y coincide con los cálculos hechos en [18, 19, 20], mostrando una estructura de escalones de una unidad de alto. La línea punteada muestra el ratchet inclinado con F=1, el cual también tiene escalones de una unidad de alto. En (b), (c) y (d) mostramos

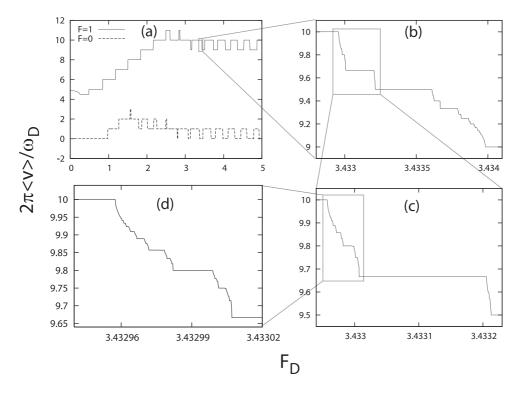


Figura 7.5: Velocidad promedio escalada $2\pi \langle v \rangle / \omega_D$ en función de la amplitud del forzamiento periódico F_D . (a) La línea punteada indica el caso cuando la inclinación está ausente F=0 y la línea continua es el caso con una inclinación F=1. (b),(c) y (d) corresponden a magnificaciones sucesivas de la corriente para el ratchet inclinado, mostrando una estructura de escalones autosimilar, típica de una escalera del diablo. En ambos casos usamos $\omega_D=0.7$

magnificaciones sucesivas de la velocidad promedio escalada la cual exhibe una estructura de escalones autosimilar, típica de una escalera del diablo $[81,\,82]$. Esta estructura detallada ha sido reportada anteriormente $[19,\,20]$ para el ratchet sobreamortiguado sin inclinación, en este trabajo mostramos esta estructura fractal en la corriente con una escalera del diablo también para el ratchet inclinado y la podemos asociar al fenómeno se sincronización.

Ahora fijémonos en las definiciones de la velocidad y frecuencia promedio

$$\langle v \rangle = \frac{N_k}{t_k},$$

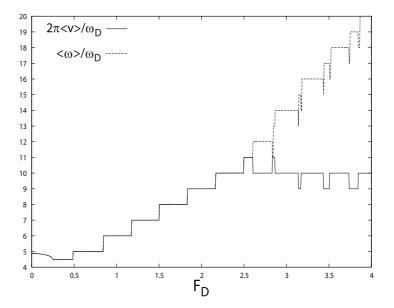


Figura 7.6: La línea continua muestra la velocidad promedio escalada y la línea punteada muestra la frecuencia promedio escalada, en ambos casos contra la amplitud del forzamiento periódico F_D . Note que estas dos líneas coinciden para un rango de F_D , debido a que todos los saltos son hacia la derecha.

$$\langle \omega \rangle = 2\pi \frac{k}{t_k},$$

donde N_k y k están dadas por las definiciones 7.1, de las cuales se puede ver que para F > 0 y F_D menores que una fuerza crítica F_D^c , no hay saltos hacia la izquierda, esto es $N_k^L = 0$. Para este caso la velocidad promedio y la frecuencia promedio escaladas coinciden, esto es

$$2\pi \langle v \rangle = \langle \omega \rangle. \tag{7.12}$$

En la figura 7.6 mostramos como la velocidad y frecuencia promedio escaladas en función de la amplitud de forzamiento F_D coinciden para un valor de $F_D < F_D^c$. Desde luego que esta F_D^c tiene que ver con la amplitud necesaria para que haya saltos a la izquierda y depende de la frecuencia del forzamiento ω_D [68] y de la inclinación F.

En las siguientes figuras vamos a utilizar a $F_D < F_D^c$, de tal forma que la frecuencia promedio coincida con 2π veces la velocidad promedio, por lo

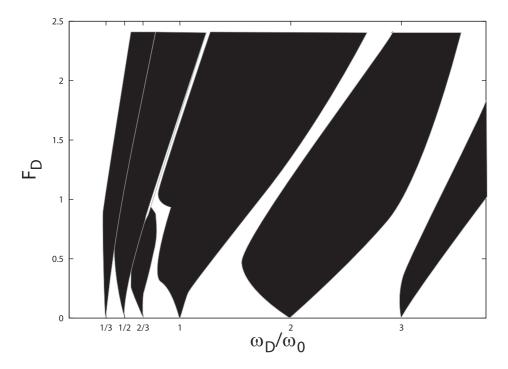


Figura 7.7: Lenguas de Arnold en el espacio de parámetros F_D contra ω_D/ω_0 . Las lenguas de Arnold están localizadas justamente en los valores racionales $\omega_D/\omega_0 = q/p$, donde $p \neq q$ son números enteros. Para esta figura se utilizaron los valores de la inclinación F=1 y su correspondiente frecuencia natural $\omega_0 \simeq 3.41$.

que hablaremos indistintamente de estas dos cantidades según nos convenga y hasta que no se especifique lo contrario.

En la figura 7.7 mostramos en el espacio de parámetros F_D contra ω_D/ω_0 las zonas de sincronización, llamadas lenguas de Arnold¹, para los valores de la inclinación F=1 la cual le corresponde una frecuencia natural del rotor $\omega_0 \simeq 3.41$. En estas zonas o regiones, la razón $\langle \omega \rangle/\omega_D$ (ó $2\pi \langle v \rangle/\omega_D$) es una constante formada por la razón de dos números enteros p/q (sincronización p:q) y localizadas en los valores de $\omega_D/\omega_0=q/p$. De esta forma mostramos el enganche de frecuencias entre la frecuencia promedio del ratchet inclinado y forzado $\langle \omega \rangle$ con la frecuencia del forzamiento ω_D propiamente como un fenómeno de sincronización.

¹Sólo mostramos las lenguas de Arnold más notorias.

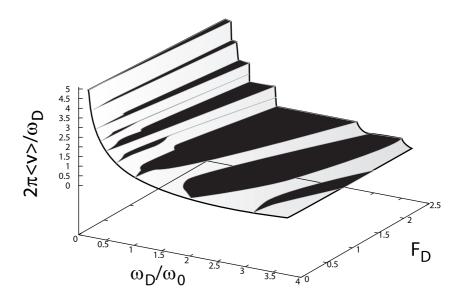


Figura 7.8: Gráfica tridimensional de la velocidad promedio escalada $2\pi \langle v \rangle/\omega_D$ como función de F_D y ω_D/ω_0 . Una proyección de esta gráfica 3D muestra las lenguas de Arnold en el espacio de parámetros de la figura 7.7. Aquí F=1 y $\omega_0\simeq 3.41$

En la figura 7.8 mostramos una gráfica tridimensional de la velocidad promedio escalada en función de F_D y ω_D/ω_0 , para los valores de F=1 y $\omega_0 \simeq 3.41$. Una proyección de esta gráfica en el espacio de parámetros nos da las lenguas de Arnold de la figura 7.7. Cabe aclarar que en esta figura y la anterior sólo están representadas las lenguas de Arnold más anchas, ya que como vimos anteriormente, estas presentan una estructura fina, que por cuestión de resolución, no es posible observarlas en estas gráficas.

Además de la proyección de esta gráfica, podemos hacer cortes sobre los ejes. Un corte ya lo hemos mostramos en la figura 7.5, la cual la obtuvimos manteniendo a ω_D constante $\omega_D=0.7$. Ahora en la figura 7.9 mostramos un corte de la gráfica tridimensional 7.8 manteniendo a F_D constante $F_D=0.5$. En esta figura es explícito que la lengua p:q le corresponde el valor de la velocidad promedio escalada p/q y las lenguas están localizadas en su origen en los valores $\omega_D/\omega_0=q/p$.

Desde luego que queremos conectar claramente las propiedades de transporte con la sincronización. La propiedad más importante es la corriente o

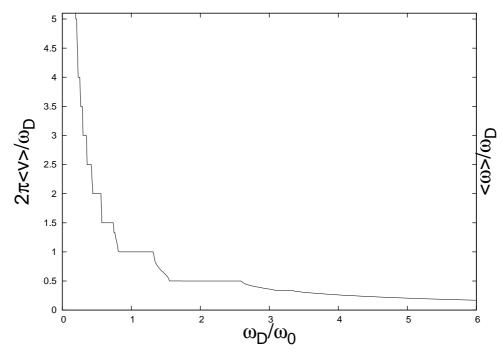


Figura 7.9: Corte de la gráfica 3D 7.8 manteniendo a F_D constante. Aquí vemos explícitamente que la lengua de Arnold p:q, corresponde al valor de la velocidad promedio escalada p/q. Aquí F=1, $\omega_0 \simeq 3.41$ y $F_D=0.5$.

la velocidad promedio, la cual como ya aclaramos, coincide con la frecuencia promedio propiamente escalada. En la figura 7.10 tenemos a la velocidad promedio escalada ahora con ω_0 la cual coincide con la frecuencia promedio escalada con la misma ω_0 . Ahora tenemos segmentos rectos en lugar de escalones por que estamos escalando con ω_0 (el cual es un parámetro fijo para una inclinación F fija), al lugar de escalar con el parámetro ω_D que corre en el eje x. Note que los picos de la velocidad promedio corresponden a los bordes de las lenguas de Arnold, de tal forma que cuando estamos cruzando una lengua de Arnold (región de sincronización) la corriente incrementa linealmente con ω_D/ω_0 ; en el borde derecho la corriente es un maximal y afuera de la lengua la corriente decrece repentinamente hasta que llegamos a la siguiente lengua, en la cual empieza a incrementar otra vez, y así se sigue. En el borde derecho de la legua de Arnold 1:1 (q/p=1), la corriente tiene su máximo, seguido por el segundo pico más grande en el borde derecho de

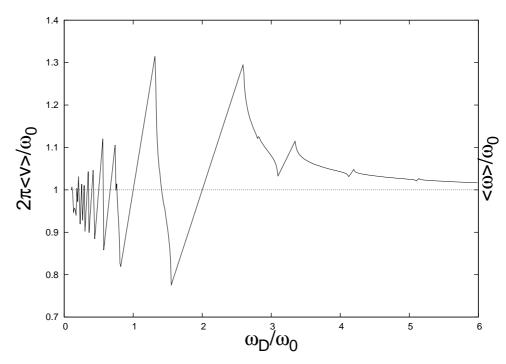


Figura 7.10: Velocidad promedio escalada ahora con ω_0 y la frecuencia promedio escalada con ω_0 también, como función de ω_D/ω_0 . Los segmentos rectos corresponden a los escalones en la figura 7.9, debido a la sincronización, los máximos de la velocidad promedio están localizados en los bordes derechos de las lenguas de Arnold. Aquí otra vez F = 1, $\omega_0 \simeq 3.41$ y $F_D = 0.5$.

la lengua 1:2(q/p=2). Los picos de la corriente dependen tanto del ancho de las lenguas de Arnold como de la pendiente de los segmentos lineales. La pendiente de los segmentos lineales es precisamente el valor q/p que etiqueta a la lengua de Arnold p:q. Entonces los picos de la corriente están asociados al fenómeno de la sincronización.

Cabe hacer notar que en la figura 7.10 para ω_D grandes la frecuencia promedio tiende a la frecuencia natural ω_0 . Si estamos en lengua p:q, esto es, $\langle \omega \rangle = (p/q)\omega_D$, y para los valores del forzamiento externo $\omega_D = (q/p)\omega_0$, obtenemos que $\langle \omega \rangle/\omega_0 = 1$. Esto es, si la lengua p:q sigue centrada en $\omega_D/\omega_0 = q/p$, entonces en la gráfica 7.10 la corriente escalonada con ω_0 cruza la línea $\langle \omega \rangle/\omega_0 = 1$ justamente en $\omega_D/\omega_0 = q/p$.

En la figura 7.11 mostramos en (a) la lengua de Arnold 1:1 y tres puntos:

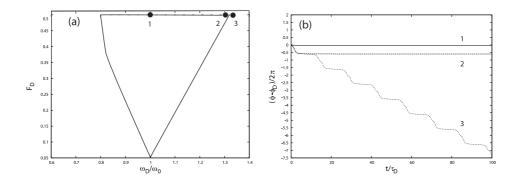


Figura 7.11: En la figura (a) mostramos la lengua de Arnold 1:1 resaltando 3 puntos en el espacio de parámetros: 1 $(\omega_D/\omega_0=1.0)$, 2 $(\omega_D/\omega_0=1.3251)$ y 3 $(\omega_D/\omega_0=3.328)$, todos con $F_D=0.5$. En la figura (b) mostramos la diferencia entre la fase lineal (7.2) y la fase de la fuerza externa periódica $\phi_D=\omega_D t$ en función del tiempo t/τ_D , con $\tau_D=2\pi/\omega_D$, para los puntos 1, 2 y 3.

 $1 \ (\omega_D/\omega_0=1.0)$ centrado en la lengua, $2 \ (\omega_D/\omega_0=3.3251)$ en el borde derecho de la Lengua y $3 \ (\omega_D/\omega_0=3.328)$ afuera de la lengua cerca del borde. En (b) graficamos la diferencia de la fase lineal (7.2) con la fase del forzamiento $\phi_D = \omega_D t$, en función del tiempo t/τ_D , donde $\tau_D = 2\pi/\omega_D$ es el periodo del forzamiento. Podemos ver que para los puntos $1 \ y \ 2$ que están dentro de la región de sincronización la diferencia de fase es constante, siendo cero sólo para el punto $1 \ que$ está justamente en el centro, para el punto $3 \ la \ dinámica de la diferencia de fase es intermitente: la dinámica aparece con saltos repentinos de <math>2\pi \ intercalados$ con épocas de un comportamiento casi sincronizado. Cabe mencionar que este comportamiento cualitativo de la dinámica de la diferencia de fase para los puntos de adentro y afuera de la lengua de Arnold es general para el fenómeno de sincronización [12].

Hasta ahora hemos estudiado la sincronización en el ratchet determinista, sin embargo, se sabe [12] que este fenómeno está presente incluso si el sistema tiene una componente ruidosa pequeña (comparado con la altura del potencial $m\gamma D/U_r\ll 1$). Para adicionamos una componente ruidosa $\sqrt{2D}\xi(t)$ a la ecuación de movimiento (7.10), donde $\xi(t)$ representa un ruido blanco Gaussiano delta correlacionado y D es el coeficiente de difusión adimensional. Luego podemos resolver la ecuación de Langevin con el algoritmo de la sección 3.3.

En la figura 7.12 se muestra la velocidad promedio (ahora es un promedio

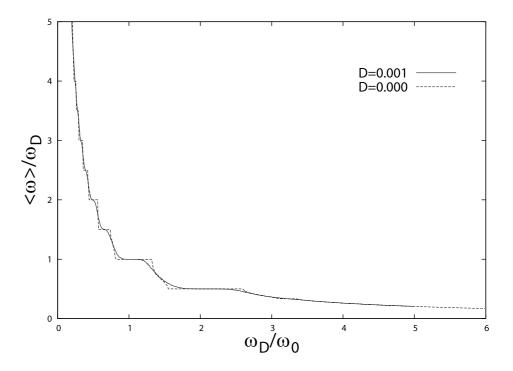


Figura 7.12: Velocidad promedio escalada en función de la frecuencia del forzamiento escalada ω_D/ω_0 , con una inclinación F=1.0 y una amplitud de forzamiento $F_D=1.0$. En la línea punteada se muestra el caso determinista (D=0.0). En la línea continua se muestra el caso con ruido D=0.001.

temporal mas un promedio sobre un ensamble de 400 partículas) escalada en función de la frecuencia del forzamiento escalada ω_D/ω_0 , con una inclinación de F=1 y una amplitud del forzamiento $F_D=1.0$. En la línea punteada se muestra el caso determinista (D=0). En la línea continua se muestra el caso con D=0.01. Podemos observar que el fenómeno de sincronización se mantiene en las lenguas 1:1 y 1:2, incluso en la presencia de ruido.

Capítulo 8

Sincronización del Ratchet inercial

En la mayoría de los trabajos sobre motores Brownianos se estudia sólo la dinámica sobreamortiguada, sin embargo, existe interés por el efecto de la inercia en los ratchets, en particular en el caso determinista [16, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 68, 83, 84, 85, 86, 87, 88, 89, 90, 91, 92, 93, 94, 95, 96, 97]. Estos ratchet tienen en general una dinámica caótica que altera sus propiedades de transporte.

La dinámica inercial y determinista (temperatura cero) de una partícula de masa m en presencia del potencial ratchet y de una fuerza externa f(t) es

$$m\ddot{x} + m\gamma\dot{x} = -\frac{dV(x)}{dx} + F(t), \tag{8.1}$$

donde γ es el coeficiente de fricción divido por la masa, F(t) es una función periódica del tiempo, de periodo $T_D = 2\pi/\omega_D$, dada por

$$F(t) = F_D \cos(\omega t). \tag{8.2}$$

El potencial ratchet V(x) está dado por

$$V(x) = -V_0 \left[\sin \left(2\pi \frac{x - x_0}{L} \right) - \frac{1}{4} \sin \left(4\pi \frac{x - x_0}{L} \right) \right] + V_1, \tag{8.3}$$

donde L es el periodo del potencial $V(x+L)=V(x),\ V_1$ y x_0 son dos constantes tal que el mínimo del potencial se encuentra en el origen. Cuyos valores son $V_1/V_0\approx 1.1$ y $x_0/L\approx -.19$.

Es conveniente hacer un cambio de variable para trabajar con una ecuación adimensional. Definamos las siguientes cantidades adimensionales

$$x' = x/L, \qquad t' = \gamma t, \tag{8.4}$$

(8.5)

$$\omega_D' = \frac{\omega_D}{\gamma}, \quad F_D' = \frac{F_D}{mL\gamma^2}.$$

$$V_0' = \frac{V_0}{mL^2\gamma^2}, \quad V_1' = \frac{V_1}{mL^2\gamma^2}.$$
 (8.6)

Entonces, la ecuación de movimiento adimensional, después de quitar las primas a las variables queda como

$$\ddot{x} + \dot{x} = -\frac{dV(x)}{dx} + F_D \cos(\omega_D t), \tag{8.7}$$

donde el potencial adimensional es

$$V(x) = -V_0 \left[\sin(2\pi(x - x_0)) + \frac{1}{4}\sin(4\pi(x - x_0)) \right] + V_1, \tag{8.8}$$

con $V_1/V_0 \approx 1.1$. En la fig. 8.1 se muestra una gráfica del potencial ratchet.

Queremos saber si existe la posibilidad de una dinámica caótica. Para esto revisaremos algunos conceptos generales de sistemas dinámicos caóticos [98].

En general es usual llamar "caos" a la evolución temporal irregular e impredecible de un sistema no lineal. Una característica importante es que el sistema no repita su comportamiento; a pesar de esta falta de regularidad los sistemas caóticos siguen ecuaciones determinista como las de la segunda ley de Newton.

Un fenómeno importante de la dinámica caótica es la sensibilidad a condiciones iniciales, como, por ejemplo, dos sistemas idénticos, cada uno con condiciones iniciales ligeramente diferentes, debido a errores asociados a la medición. Para sistemas no caóticos el error en la predicción crecerá linealmente en el tiempo, mientras que en un sistema caótico el error crecerá exponencialmente en el tiempo, por lo que el estado del sistema se volverá prácticamente impredecible después de un tiempo relativamente corto. El hecho de que la capacidad de predicción se vea limitada en sistemas caóticos nos recuerda a los sistemas estocásticos (un sistema sujeto a fuerzas externas

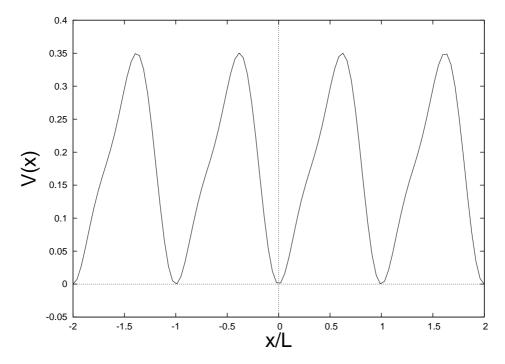


Figura 8.1: Potencial ratchet adimensional (8.8)

azarosas), sin embargo, el origen de la irregularidad es totalmente diferente. Para el caos la irregularidad es parte de la dinámica intrínseca del sistema, no de influencias externas azarosas.

Consideremos un sistema dinámico determinista, para el cual las condiciones necesarias para la existencia de un movimiento caótico son:

- Sensibilidad ante condiciones iniciales (divergencia exponencial de trayectorias).
- Confinamiento del movimiento a una región finita del espacio fase de las variables dinámicas.
- Movimiento no periódico.

Para cumplir con estas tres condiciones en un sistema dinámico gobernado por un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias en el continuo, y teniendo en cuenta las limitaciones que impone el teorema de existencia y unicidad necesitamos al menos 3 variables. Ya que en un espacio de tres

dimensiones podemos "estirar" y "doblar" las órbitas sin que se intercepten en un punto. Es como si el caos mezclara las orbitas en el espacio fase de la misma manera que un panadero mezcla la masa al cortarla, primero estira la masa (divergencia) y luego la dobla (confinamiento).

A pesar de que en algunas ocasiones es posible utilizar aproximaciones linealizadas, generalmente las ecuaciones diferenciales no lineales de primer orden son muy difíciles o incluso imposibles de resolver analíticamente, por lo que su solución requiere métodos numéricos cuya implementación práctica demanda el uso de una computadora.

Podemos observar que la ecuación (8.7) cumple con las condiciones antes mencionadas, ya que esta ecuación es equivalente a tres ecuaciones diferenciales de primer orden debido a la presencia explícita de la función F(t), y como el potencial ratchet es no lineal es posible la existencia de una dinámica caótica. Si el término de inercia estuviera ausente, entonces el sistema dinámico no puede ser caótico.

8.1. Inversión de corriente y diagrama de bifurcación

Consideremos el sistema dinámico (8.7), este sistema está descrito por una ecuación diferencial no lineal de segundo orden, y no es posible obtener una solución analítica, por lo que se usara el algoritmo de Runge-Kutta de cuarto orden para obtener una solución numérica del sistema [99].

Existen varias herramientas para analizar la dinámica caótica de un sistema, entre ellas estan la sección de Poincaré y el diagrama de bifurcación.

La sección de Poincaré es una técnica desarrollada por Poincaré para simplificar el diagrama del espacio fase de sistemas complicados. Se construye viendo el espacio fase estroboscópicamente. Para sistemas con un forzamiento externo periódico, la frecuencia estroboscópica coincide con la frecuencia del forzamiento.

La sección de Poincaré puede proporcionar información de la razón entre la frecuencia estroboscópica ω_s , y la frecuencia natural de la dinámica ω_0 . Por ejemplo, si un movimiento tiene una frecuencia natural $\omega_0 = 2\omega_s$, la sección de Poincaré tendrá sólo dos puntos. En general si la relación es $\omega_0/\omega_s = p/q$, donde p/q es racional, entonces hay q puntos, y el orden de su aparición es tal que, cuando un punto dado aparece en el diagrama, los siguientes q - (p+1)

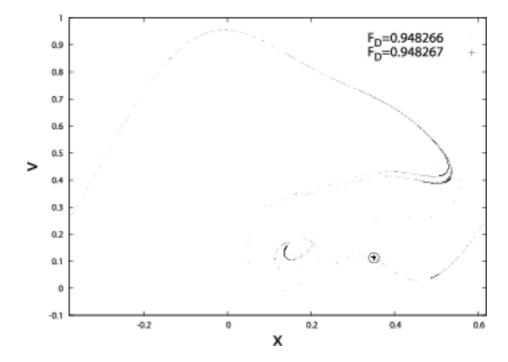


Figura 8.2: Sección de Poincaré de la ecuación (8.7) para ω_D =0.895. En puntos podemos observar un atractor caótico para F_D =0.948266, con cruces vemos un atractor periódico (de periodo 1) para F_D =0.948267.

son saltados. Con ayuda del diagrama de Poincaré podemos diferenciar entre orbitas periódicas y caóticas, y podemos obtener el diagrama de bifurcación en función de la amplitud F_D .

En la figura 8.2 se muestra la sección de Poincaré de la ecuación (8.7) después de un transiente, para el valor de ω_D =0.895 y con condiciones iniciales de x(0)=0, v(0)=0. Para F_D =0.948266, la sección de Poincaré nos muestra un atractor caótico y para un valor ligeramente diferente de F_D (F_D =0.948267) el atractor es periódico. Para obtener un panorama más general de la dinámica sobre un rango de uno de los parámetros es necesario el diagrama de bifurcación. Con el diagrama de bifurcación podemos comparar simultáneamente el comportamiento periódico o caótico del sistema.

Como ya lo indicamos anteriormente, cuando el valor de un parámetro cambia ligeramente, puede cambiar la dinámica. Este cambio depende de las condiciones iniciales. En dinámica cuando el número de soluciones de

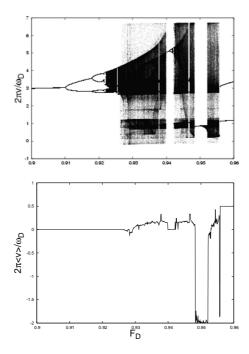


Figura 8.3: Para ω_D =0.895. se muestra en la figura superior el diagrama de bifurcación, en la figura inferior vemos el promedio temporal de la velocidad normalizado por la frecuencia externa.

una ecuación diferencial cambia (de una a dos o varias soluciones estables) cuando variamos un parámetro del sistema se llama bifurcación. Para nuestro caso podemos detectar bifurcaciones graficando los valores de v del diagrama de Poincaré contra la contra la amplitud de forzamiento F_D . Este tipo de gráficas se llaman diagramas de bifurcación.

En el artículo [22], se estudia la relación entre el diagrama de bifurcación y la velocidad promedio y se identifica el origen de las inversiones de corriente como una bifurcación del régimen caótico a uno periódico. En la figura superior 8.3 se muestra el diagrama de bifurcación para $\omega_D = 0.895$ para un rango de F_D . Podemos observar una ruta al caos por doblamiento de periodo y después de esta región caótica hay una bifurcación que toma lugar al valor crítico $F_D^c \approx 0.9482665$, es en este punto de bifurcación donde ocurre la inversión de corriente. Después de este punto de bifurcación una ventana de periódica emerge, con una orbita de periodo 1. En la figura inferior 8.3 se muestra el promedio temporal de la velocidad (7.5), normalizado con la

frecuencia externa dividida por 2π (que es el número de oscilaciones de la fuerza externa por unidad de tiempo), con el mismo rango que el diagrama de bifurcación. Podemos observar una transición abrupta justamente en el punto de bifurcación que da origen a una inversión de corriente.

Aunque ya se ha abordado el enganche de fase en ratchets en otros trabajos [86, 87], no es clara la definición de fase y su relación con la sincronización. Por lo que en la siguiente sección abordaremos la sincronización en ratchets propiamente caracterizada por las lenguas de Arnold.

8.2. Resultados numéricos

Siguiendo la misma línea que en el caso sobreamortiguado, utilizamos la misma definición de fase de la sección 7.1 (ecuación (7.2)), En esta sección resolveremos numéricamente la ecuación de movimiento del ratchet inclinado y mecido

$$\ddot{x} + \dot{x} = -\frac{dV(x)}{dx} + F + F_D \cos(\omega_D t), \tag{8.9}$$

donde V(x) es el potencial ratchet, F es una fuerza constante, F_D es la amplitud del forzamiento periódico y ω_D es la frecuencia del forzamiento.

Usamos un algoritmo de Runge-Kutta de cuarto orden [99] para resolver la ecuación diferencial (8.9). Tomaremos como condiciones iniciales que al tiempo t=0 la posición x(t=0)=0 y la velocidad v(t=0)=0. Una vez que obtenemos la trayectoria completa, identificamos al conjunto de tiempos discretos $\{t_k\}$ cuando la partícula cruza las posiciones x_k . Con estos eventos marca, podemos utilizar las definiciones de la sección 7.1. Calculamos la frecuencia promedio a partir de (7.3) y la velocidad promedio de (7.5). Otra vez fijaremos la amplitud del potencial $V_0=1/2\pi$. Como ya se ha mencionado antes, esta definición es muy general y puede ser usada en sistemas caóticos o incluso con sistemas que contienen ruido.

8.2.1. Ratchet inclinado inercial como un rotor

Consideremos ahora la dinámica determinista inercial del ratchet inclinado

$$\ddot{x} + \dot{x} = -\frac{dV(x)}{dx} + F,\tag{8.10}$$

donde V(x) es el potencial ratchet (8.8) y F es una fuerza constante.

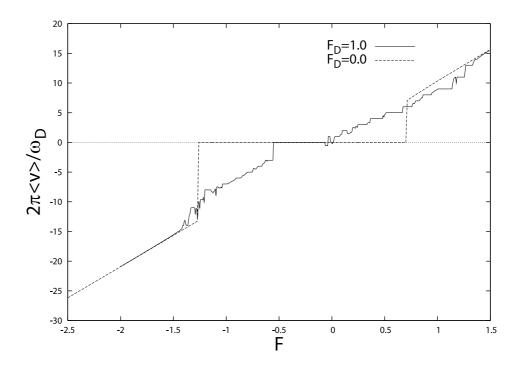


Figura 8.4: Velocidad promedio como función de la inclinación F. La línea punteada muestra el caso sin forzamiento periódico $F_D = 0$ (rotor). La línea continua muestra el caso con forzamiento periódico $F_D=1.0$ y $\omega_D=0.6$.

En la figura 8.4 se muestra en la línea punteada la dinámica (8.10). Al igual que el caso sobreamortiguado existen valores críticos $F_c^R \simeq 0.72$ y $F_c^L \simeq 1.27$, para valores de F entre estos dos valores críticos la velocidad es cero, sin embargo a diferencia del caso sobreamortiguado, la curva tiene una discontinuidad en estos valores críticos debido a la inercia.

En la figura 8.5 se muestra en la línea punteada la frecuencia promedio escalada en función de la inclinación F, esto es, la frecuencia "natural" o característica del rotor ω_0 . Por ejemplo, para una inclinación de F=1, le corresponde una frecuencia característica $\omega_0 \simeq 6.19974321$.

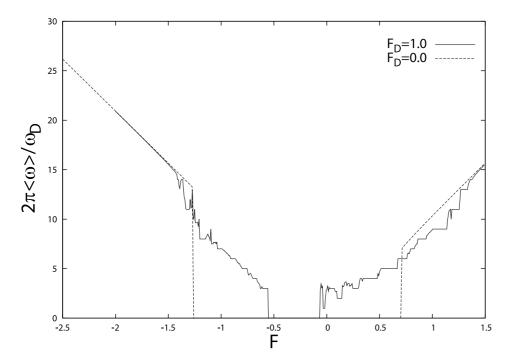


Figura 8.5: frecuencia promedio como función de la inclinación F. La línea punteada muestra el caso sin forzamiento periódico $F_D=0$ (rotor), la cual da el valor de la frecuencia "natural" o característica del rotor para una F fija. La línea continua muestra el caso con forzamiento periódico $F_D=1.0$ y $\omega_D=0.6$.

8.2.2. Sincronización del ratchet inclinado con inercia con una fuerza externa periódica

Teniendo nuestro rotor forzado (ratchet inclinado) con una frecuencia característica ω_0 , podemos sincronizarlo con una fuerza externa periódica. Lo que implica que los valores de la frecuencia y velocidad propiamente escalada con la frecuencia de forzamiento ω_D , pueden tomar valores p/q, donde p y q son dos enteros.

En la figura 8.4 se muestra en la línea continua la velocidad escalada $2\pi \langle v \rangle / \omega_D$ en función de la inclinación F, para una amplitud del forzamiento $F_D = 1$ y $\omega_D = 0.6$. Se puede observar claramente escalones donde $2\pi \langle v \rangle / \omega_D = p/q$, donde p y q son enteros. Sin embargo, a diferencia del caso

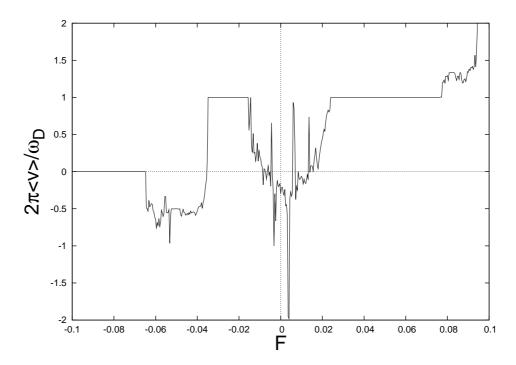


Figura 8.6: Acercamiento de la figura 8.4. La velocidad promedio es positiva para valores de la inclinación F negativas.

sobreamortiguado, estos escalones no se mantienen en todo el rango de F. Podemos observar que cerca de F=0, para F negativas la velocidad promedio es positiva. En la figura 8.6 se muestra un acercamiento de esta zona, este efecto ya ha sido reportado [96] para el caso inercial.

En la figura 8.5 se muestra en la línea continua la frecuencia promedio escalada $\langle \omega \rangle / \omega_D$ en función de la inclinación F, para valores de la amplitud de forzamiento $F_D = 1$ y la frecuencia de forzamiento $\omega_D = 0.6$. Al igual que la velocidad promedio, la frecuencia promedio escalada muestra escalones donde $\langle \omega \rangle / \omega_D = p/q$, con p y q enteros. Mostrando claramente un enganchamiento de frecuencias. Sin embargo, como estamos variando la inclinación F, no queda claro la relación con la frecuencia característica ω_0 de rotor con la sincronización. Por lo que en los siguientes cálculos fijaremos la inclinación F = 1 con su correspondiente frecuencia $\omega_0 \simeq 6.19974321$.

En la figura 8.7, se muestra en la gráfica inferior a la velocidad promedio escalada en función de la amplitud de forzamiento F_D , para una frecuencia

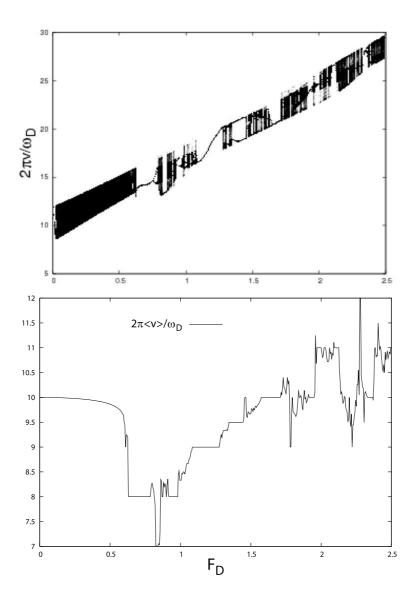


Figura 8.7: Se muestra en la figura superior el diagrama de bifurcación y en la figura inferior vemos el promedio temporal de la velocidad escalada con la frecuencia externa en función de la amplitud de forzamiento F_D , para una frecuencia $\omega_D/\omega_0=0.1$, para una inclinación F=1.

de forzamiento $\omega_D/\omega_0 = 0.1$ y una inclinación de F = 1 (que le corresponde una $\omega_0 \simeq 6.19974321$). Al igual que en el caso anterior existen escalones para valores de la velocidad promedio escalada $2\pi \langle v \rangle/\omega_D$ en p/q, con p,q enteros. Sin embargo hay intervalos para los cuales la corriente varia mucho, lo cual pede indicar la existencia de caos.

Siguiendo el artículo [22], se calcula el diagrama de bifurcación y se muestra en la gráfica superior de la figura 8.7. Podemos observar que las regiones donde hay caos, la velocidad promedio escalada no esta enganchada a p/q. y en las regiones del diagrama de bifurcación donde la orbita es periódica, la velocidad promedio escalada está enganchada.

En el diagrama de bifurcación de la figura 8.7, para F_D <0.5859 pareciera que existe caos, sin embargo, si observamos la misma región en la figura de abajo, el comportamiento de la velocidad promedio escalada es más bien constante, debido a que los atractores en ese intervalo no son caóticos. En la figura 8.8, mostramos la sección de Poincaré para dos valores de F_D . En la figura superior se muestra la sección de Poincaré para F_D =0.5, podemos ver que el atractor es cuasiperiódico. En la figura inferior se muestra la sección de Poincaré para F_D =1.75, en este caso el atractor es caótico. Por lo tanto podemos diferenciar tres zonas en el diagrama de bifurcación de la figura 8.7, la primera (F_D <0.5859) corresponde a una serie de atractores cuasiperiódicos, después de esta zona se intercalan zonas de atractores caóticos con atractores periódicos. El cambio entre estos atractores corresponde a un cambio abrupto en la corriente promedio, se puede observar que para atractores periódicos la corriente promedio escalada está enganchada con valores p/q, con p,q enteros.

En la figura 8.9 se muestra la velocidad promedio escalada en función de la amplitud F_D . En (b), (c) y (d) se muestran sucesivas ampliaciones de (a). Podemos observar que aunque existe caos, hay regiones dentro de las ampliaciones donde la velocidad promedio escalada está enganchada. Debido al caos, ya no hay una estructura detallada como en el caso sobreamortiguado, sin embargo, existe una estructura autosimilar.

En la figura 8.10 se muestra el espacio de parámetros F_D contra ω_D/ω_0 que muestra las regiones de sincronización, llamadas lenguas de Arnold, localizadas en valores racionales q/p, con p,q enteros. Cada lengua de Arnold está etiquetada por estos valores enteros p:q, implicando que las lenguas de Arnold para $F_D=0$ empiezan en los valores de $\omega_D/\omega_0=q/p$ y toda la lengua p:q corresponde al valor de la velocidad promedio escalada $2\pi\langle v\rangle/\omega_D=p/q$. Esta gráfica es una proyección de la gráfica tridimensional 8.11.

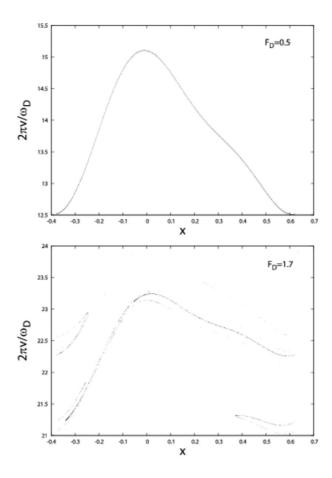


Figura 8.8: Sección de Poincaré para el ratchet sobreamortiguado con una inclinación F=1. En la figura superior se muestra un atractor cuasiperiódico para una amplitud de forzamiento $F_D=0.5$. En la figura inferior se muestra un atractor caótico para una amplitud de forzamiento $F_D=1.75$. En ambos casos se utilizó una frecuencia de forzamiento $\omega_D/\omega_0=0.1$.

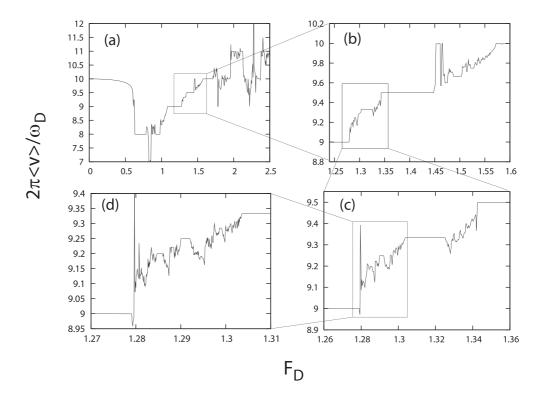


Figura 8.9: (a) Velocidad promedio escalada para el ratchet inercial en función de la amplitud del forzamiento F_D , con una inclinación de F=1 y una frecuencia del forzamiento $\omega_D/\omega_0=0.1$. (b), (c) y (d) se muestran sucesivas ampliaciones de (a).

En la figura 8.11 mostramos a la velocidad promedio escalada $2\pi \langle v \rangle / \omega_D$ en función de de la amplitud de forzamiento F_D y la frecuencia del forzamiento escalada ω_D/ω_0 . Con esta gráfica podemos obtener con una proyección a las Lenguas de Arnold de la figura 8.10. Con un corte manteniendo a ω_D/ω_0 y variando a F_D , obtenemos la gráfica 8.9. La gráfica 8.12 es un corte de 8.11, ahora manteniendo a F_D fijo y variando a ω_D/ω_0 .

En la figura 8.12 se muestra la velocidad promedio escalada $2\pi \langle v \rangle / \omega_D$ en función de la frecuencia del forzamiento escalada ω_D/ω_0 . Podemos ver claramente en esta figura los escalones para $2\pi \langle v \rangle / \omega_D = p/q$, con p,q enteros. Esta figura es un corte de la gráfica tridimensional 8.11, con $F_D=1.0$. Cada escalón corresponde a una lengua de Arnold p:q localizada para $F_D=0$ en

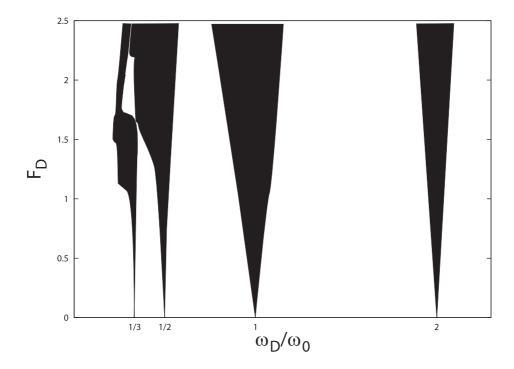


Figura 8.10: Lenguas de Arnold en el espacio de parámetros F_D contra ω_D/ω_0 , para el ratchet inercial con una inclinación de F=1 ($\omega_0 \simeq 6{,}19774321$).

 $\omega_D/\omega_0 = q/p.$

En la figura 8.13 se muestra al velocidad promedio escalada ahora con la frecuencia característica ω_0 en lugar del parámetro que corre ω_D . Las líneas rectas corresponden a los escalones de la figura 8.12, cuya pendiente es precisamente el valor del enganchamiento de $2\pi \langle v \rangle/\omega_D = p/q$. Podemos ver que los máximos de la corriente están en los bordes derechos de las lenguas de Arnold, lo que implica que, al igual que el caso sobreamortiguado, la corriente máxima promedio se debe a un efecto conjunto entre el ancho de la lengua y el valor de la pendiente (el valor del enganchamiento).

Al igual que en el caso sobreamortiguado, queremos investigar la sincronización en presencia de ruido. Para ello podemos adicionar una componente ruidosa $\sqrt{2D}\xi(t)$ a la ecuación de movimiento (8.7), donde $\xi(t)$ representa un ruido blanco Gaussiano delta correlacionado y D es el coeficiente de difusión adimensional $(D/L^2\gamma)$.

En la figura 8.14 se muestra la velocidad promedio (ahora es un promedio

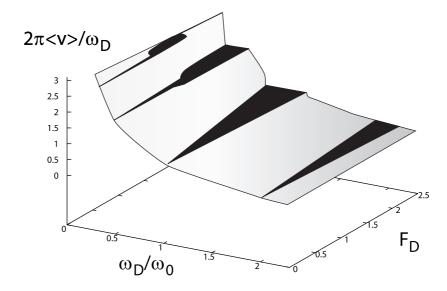


Figura 8.11: Gráfica tridimensional de la velocidad promedio escalada $2\pi \langle v \rangle / \omega_D$ en función de la amplitud de forzamiento F_D y la frecuencia del forzamiento escalada ω_D/ω_0 , para una inclinación F=1 ($\omega_0 \simeq 6.19774321$). Una proyección de esta gráfica muestra las lenguas de Arnold de la figura 8.10.

temporal mas un promedio sobre un ensamble de 400 partículas) escalada en función de la frecuencia del forzamiento escalada ω_D/ω_0 , con una inclinación de F=1 y una amplitud del forzamiento $F_D=1.0$. En la línea continua se muestra el caso determinista (D=0). En la línea punteada se muestra el caso con D=0.005. Podemos observar que el fenómeno de sincronización al igual que en el caso sobreamortiguado, se mantiene en la lengua 1:1, incluso en la presencia de ruido.

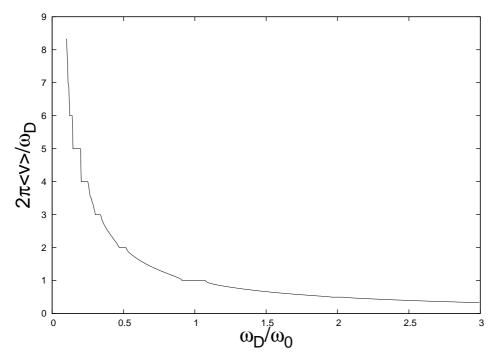


Figura 8.12: velocidad promedio escalada en función de la frecuencia escalada del forzamiento ω_D/ω_0 , para el ratchet inercial con una inclinación de F=1 y una amplitud de forzamiento $F_D=1.0$. Aquí se muestra claramente los escalones donde $2\pi \langle v \rangle/\omega_D=p/q$, con p,q enteros.

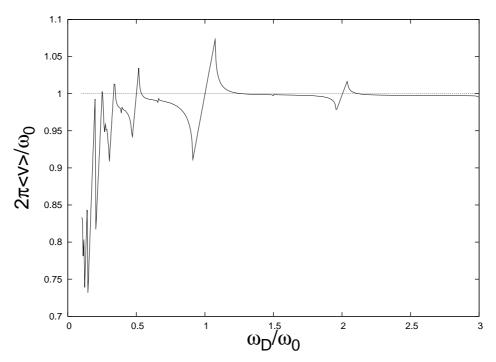


Figura 8.13: Velocidad promedio escalada ahora como $2\pi \langle v \rangle / \omega_0$ como función de la frecuencia del forzamiento escalada ω_D/ω_0 , para una inclinación de F=1 y una amplitud de forzamiento $F_D=1.0$. Las líneas rectas corresponden a los escalones de la figura 8.12. Los picos de la corriente están localizados en el borde derecho de las lenguas de Arnold.

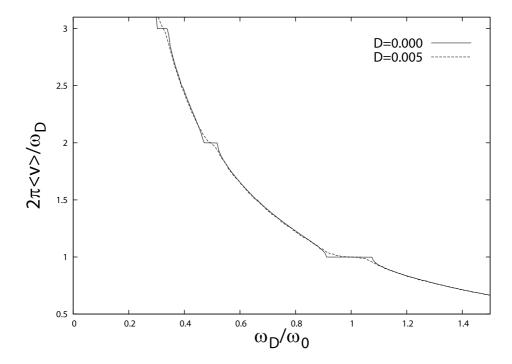


Figura 8.14: Velocidad promedio escalada $2\pi \langle v \rangle/\omega_D$ en función de la frecuencia del forzamiento escalada ω_D/ω_0 , para una inclinación de F=1.0 ($\omega_0 \simeq 6.19774321$) y una amplitud de forzamiento $F_D=1.0$. En la línea continua se muestra el caso determinista (D=0.0) y en la línea punteada se muestra el caso con ruido D=0.005.

Capítulo 9

Sincronización de dos motores Brownianos

Existen proteínas motoras en el interior de la célula capaces de realizar un transporte unidireccional. Una de estas proteínas motoras o motores moleculares es la cinesina. Esta proteína motora ha atraído considerable atención, motivada por los resultados experimentales, en los cuales detalles dinámicos de su movimiento han sido medidos [100, 8, 9]. Las cinecinas son proteínas con dos cabezas que realizan una caminata sobre microtubulos adentro de la célula. Motivados por estos resultados experimentales, varios autores [101, 102, 103, 104, 105, 106] han introducido diversos modelos para entender la forma de caminar de la cinesina. Usualmente, estos modelos consideran dos partículas acopladas sujetas al potencial ratchet, que modela la estructura periódica de los microtubulos. En las referencias [101, 102], los autores consideran dos partículas puntuales en un potencial ratchet y acopladas elásticamente (linealmente).

En [107, 108, 109, 110] se estudia un modelo motivado en la caminata de la cinesina. El modelo considera a dos partículas sobre un ratchet acopladas a través de un potencial no lineal biestable y sujetas a ruidos blancos independientes.

A pesar de que la gran mayoría de los trabajos consideran ruido, en está sección vamos a considerar la dinámica determinista de este caminante y vamos a aplicar los conceptos relacionados a la sincronización de estos caminantes con una fuerza externa periódica.

9.1. El modelo del caminante

El modelo que vamos a utilizar es el usado por [107, 108, 109, 110], el modelo considera a un caminante sobre un potencial ratchet. Este caminante tiene dos pies que son representados por dos partículas puntuales de masa m en una dimensión acopladas por un potencial no lineal biestable. Adicionalmente estas partículas están sujetas en nuestro caso a una fuerza constante F y a una fuerza periódica $F_D \sin(\omega_D t)$. La dinámica de las partículas es sobreamortiguada y esta dada por las ecuaciones

$$m\gamma \dot{x} = -\frac{dV(x)}{dx} - \frac{\partial V_b(x-y)}{\partial x} + F + F_D \sin(\omega_D t),$$

$$m\gamma \dot{y} = -\frac{dV(y)}{dy} - \frac{\partial V_b(x-y)}{\partial y} + F + F_D \sin(\omega_D t),$$
(9.1)

donde γ es el coeficiente de fricción divido por la masa, $-\partial_x V(x)$ es la fuerza debido al ratchet, $-\partial_x V_b(x-y)$ es la fuerza del acoplamiento debida al potencial biestable, F es una fuerza constante, F_D y ω_D son la amplitud y la frecuencia de la fuerza periódica respectivamente.

Estas ecuaciones representan a dos partículas sobre el potencial ratchet

$$V(x) = -V_R \left[\sin \left(\frac{2\pi(x - x_0)}{L} \right) + \frac{1}{4} \sin \left(\frac{4\pi(x - x_0)}{L} \right) \right] + V_1, \tag{9.2}$$

donde L es el periodo del potencial V(x+L)=V(x); las constantes $x_0/L\simeq$. 19 y $V_1/V_0\simeq$ 1.1 se utilizan para que el mínimo del potencial este en el origen.

El potencial biestable esta dado por

$$V_b(x-y) = V_b + V_b \left[\left(\frac{x-y}{l} \right)^4 - 2 \left(\frac{x-y}{l} \right)^2 \right], \tag{9.3}$$

donde V_b es la amplitud del potencial y representa la fuerza del acoplamiento entre las dos partículas, y 2l es la distancia entre los dos mínimos.

Sigamos con la misma convención que en las secciones anteriores para derivar las ecuaciones adimensionales. Esto es, tomemos como longitud característica a el periodo del ratchet L y como tiempo característico al inverso de γ . Definamos las siguientes cantidades adimensionales: $x' = x/L, x'_0 =$

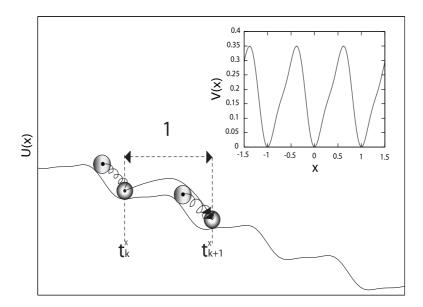


Figura 9.1: Caminante sobre el ratchet inclinado indicando la dinámica que define los eventos temporales discretos t_k^x para la partícula x. El acoplamiento se representa por un resorte sólo por motivos ilustrativos, ya que la interacción no es lineal. El potencial ratchet sin inclinación se ilustra en el recuadro.

 $x_0'/L, y'=y/L, y_0=y_0'/L, t'=t\gamma, l'=l/L, \omega_D'=\omega_D/\gamma, F'=F/mL\gamma^2, F_D'=F_D/mL\gamma^2, V_R'=V_R/mL^2\gamma^2, V_1'=V_1/mL^2\gamma^2, V_b'=V_b/mL^2\gamma^2$. Sustituyendo estas definiciones en las ecuaciones de movimiento (9.1), después quitando las primas, obtenemos las ecuaciones de movimiento adimensionales

$$\dot{x} = -\frac{dV(x)}{dx} - \frac{\partial V_b(x-y)}{\partial x} + F + F_D \sin(\omega_D t),$$

$$\dot{y} = -\frac{dV(y)}{dy} - \frac{\partial V_b(x-y)}{\partial y} + F + F_D \sin(\omega_D t),$$
(9.4)

con el potencial ratchet adimensional

$$V(x) = -V_R[\sin(2\pi(x - x_0)) + \frac{1}{4}\sin(4\pi(x - x_0))] + V_1, \tag{9.5}$$

y el potencial biestable adimensional

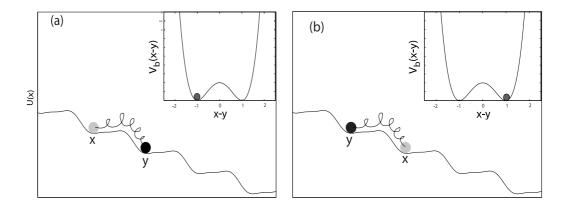


Figura 9.2: El caminante sobre el ratchet, en el recuadro se muestra el potencial biestable. (a) Si x-y<0, implica que la partícula y está adelante de la x. (b) Si x-y>0 implica que la partícula x está adelante de la partícula y. Cuando el caminante da un paso hay una transición entre los estados estables del potencial biestable.

$$V_b(x-y) = V_b \left[\left(\frac{x-y}{l} \right)^4 - 2 \left(\frac{x-y}{l} \right)^2 + 1 \right].$$
 (9.6)

Este modelo es diferente a los modelos previos [101, 102], debido a que el acoplamiento es no lineal a través de un potencial biestable. Es importante hacer notar que el acoplamiento entre las dos partículas involucra a la variable x-y. Esta variable puede ser positiva, negativa o cero. Cuando x-y>0 implica que la partícula x está adelante de la partícula y. Cuando x-y<0, ahora la partícula y está adelante de la x. Entonces, las transiciones entre los dos estados estables en el potencial biestable, corresponde al cambio de orden entre las partículas. los mínimos del potencial biestable estan localizados en $x-y=\pm l$, donde l es la distancia de relajación entre las dos partículas. Este acoplamiento no lineal nos permite considerar un aspecto de la verdadera caminata: la posibilidad de alternar los dos pies.

9.2. definición de las fases

Al igual que en los casos anteriores utilizaremos las definiciones de la fase, la velocidad promedio y la frecuencia promedio introducidas en la sección

7.1. Como ya se menciono estas definiciones son muy generales y pueden ser utilizadas en nuestro caso; desde luego, cada partícula tendrá su propia fase, velocidad promedio y frecuencia promedio. Sin embargo estamos interesados en el comportamiento global del caminante, por lo que nos centraremos en el promedio de las posiciones, esto es, en la dinámica del centro de masa z = (x + y)/2. Por lo que en lo cálculos siguientes cuando reportemos la velocidad promedio y la frecuencia promedio, nos estaremos refiriendo a la velocidad y frecuencia promedio del centro de masa z.

9.3. Resultados numéricos

En esta sección resolvemos las ecuaciones 9.4 del caminante en un ratchet inclinado y mecido por una fuerza periódica. Usamos el algoritmo de Runge-Kutta de cuarto orden para resolverlas ecuaciones 9.4. Utilizaremos las condiciones iniciales x(t=0)=0 y y(t=0)=1. Una vez que obtenemos las trayectorias completas, identificamos el conjunto de los tiempos discretos $\{t_k^x\}$ y $\{t_k^y\}$ cuando las partículas x y y cruzan las posiciones x_k y y_k respectivamente, con k entero. Con estos eventos marca calculamos para cada partícula la frecuencia promedio a partir de (7.3), y después de calcular N_k^x y N_k^y , obtenemos la corriente usando (7.5) para cada partícula. Con esto obtenemos la velocidad y frecuencia promedio como un promedio entre las velocidades y frecuencias de las partículas respectivamente. Fijaremos el valor de la amplitud del potencial ratchet a $U_r = 1/2\pi$.

A diferencia de los casos anteriores, el acoplamiento entre las partículas da una dinámica dependiente de la distancia de relajación entre los pies l y la amplitud del potencial biestable V_b . Los valores importantes de estos parámetros son con respecto al periodo del ratchet (que el caso adimensional es 1) l/1 y la razón entre las alturas de los potenciales V_b/U_r . Para simplificar, usaremos en todos los cálculos posteriores el valor de $V_b = 2U_r$ (esto es, las alturas de los potenciales similares).

En la figura 9.3 se muestra la inclinación crítica F_c para la existencia de saltos en función de la distancia de relajación entre los pies l sin forzamiento externo $(F_D = 0)$. Podemos observar que la F_c mínima se encuentra en l = 1/2 y para l = 1 esta coincide con la fuerza crítica para una sola partícula F_c =0.75, esto es, cuando l = 1 (la distancia de relajación entre las partículas es igual al periodo del ratchet), es como si no existiera acoplamiento entre las partículas (ya que siempre mantienen su distancia igual a la distancia de

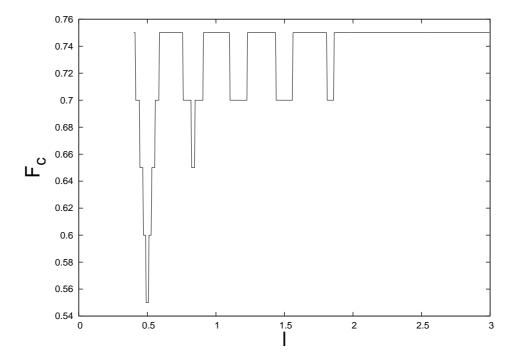


Figura 9.3: Inclinación crítica F_c para la existencia de saltos en función de la distancia de relajación de los pies l. Sin forzamiento externo $(F_D = 0.0)$ y con una amplitud del potencial biestable de $V_b = 2U_R$.

relajación) y para l=1/2, existe un comportamiento cooperativo entre las dos partículas, tal que se necesita una menor inclinación del ratchet para que existan saltos.

En la figura 9.4 se muestra la frecuencia "característica" ω_0 en función de la distancia de relajación de los do pies l, para una inclinación fija F=1. La ω_0 presenta un máximo en l=1/2, congruente con la figura 9.3. En este caso, todos los saltos son a la derecha, ya que sólo actúa la fuerza constante F=1 sobre el caminante en el ratchet, por lo que $\omega_0=2\pi\langle v\rangle$, esto es, la velocidad promedio tiene un máximo en l=1/2. Debido a esto utilizaremos en los siguientes cálculos el valor l=1/2 y una inclinación de F=1.0, para estos parámetros de l y F les corresponde una frecuencia "característica" $\omega_0 \simeq 5.14980744$.

En la figura 9.5 mostramos la velocidad promedio escalada $2\pi \langle v \rangle / \omega_D$ en función de la inclinación F. La línea continua indica el caso sin forzamiento

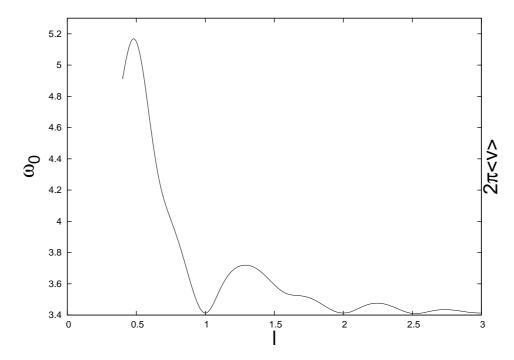


Figura 9.4: Frecuencia "característica" ω_0 en función de la distancia de relajación de los dos pies l, para una inclinación F=1.0, sin forzamiento periódico $(F_D=0.0)$. En este caso, todos los saltos son hacia la derecha y $\omega_0=2\pi\langle v\rangle$.

periódico $(F_D=0)$. La línea punteada muestra el caso con un forzamiento periódico con amplitud $F_D=1.0$ y con frecuencia $\omega_D=0.6$. Podemos ver que hay un enganche de la velocidad escalada, pero como en los casos anteriores de una sola partícula, no es claro como está relacionada la sincronización con ω_0 , de hecho, existe una velocidad promedio escalada enganchada en p/q, con p,q enteros, para valores de F en donde no está definida una frecuencia característica ω_0 . Por lo que no podemos hablar de sincronización para todo el rango de F.

En la figura 9.6 se muestra la velocidad promedio escalada $2\pi \langle v \rangle / \omega_D$ en función de la amplitud del forzamiento F_D . En (b), (c) y (d) se muestran ampliaciones sucesivas de (a). Podemos observar claramente el fenómeno de sincronización con el enganche de la velocidad promedio escalada $2\pi \langle v \rangle / \omega_D$ en los valores p/q, con p, q enteros. Al igual que en el caso de una sola partícula, la velocidad promedio muestra una estructura autosimilar de escalones,

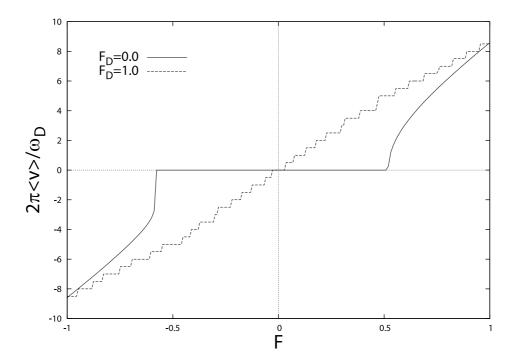


Figura 9.5: Velocidad promedio escalada $2\pi \langle v \rangle / \omega_D$ en función de la inclinación F. La línea continua muestra el caso sin forzamiento periódico $F_D = 0$. La línea punteada muestra el caso con un forzamiento periódico con una frecuencia $\omega_D = 0.6$ y una amplitud $F_D = 1.0$, para una altura del potencial biestable $V_b = 2U_R$ y una distancia de relajación entre los pies l = 0.5.

típica de una escalera del diablo.

En la figura 9.7 se muestra el espacio de parámetros F_D contra ω_D/ω_0 . que muestran las regiones de sincronización, también llamadas Lenguas de Arnold, localizadas en los valores racionales $\omega_D/\omega_0 = q/p$, con p, q enteros. Cada lengua corresponde a un valor de q/p y estan etiquetadas por estos valores. A la lengua p:q le corresponde el valor de la velocidad promedio escalada $2\pi\langle v\rangle/\omega_D=p/q$, localizadas en $\omega_D/\omega_0=q/p$.

En la figura 9.8 se muestra una gráfica tridimensional de la velocidad promedio escalada $2\pi \langle v \rangle/\omega_D$ en función de la amplitud de forzamiento F_D y la frecuencia de forzamiento ω_D/ω_0 . Una proyección sobre el espacio de parámetros F_D y ω_D/ω_0 nos da la gráfica 9.7. Podemos obtener la gráfica 9.6 a partir de un corte de la gráfica 9.8, manteniendo a ω_D constante, también

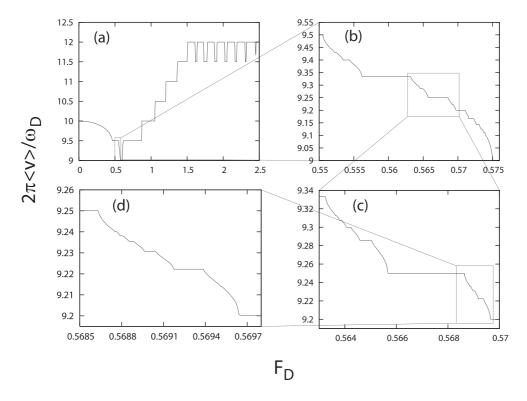


Figura 9.6: (a) Velocidad promedio escalada $2\pi \langle v \rangle / \omega_D$ en función de la amplitud del forzamiento F_D . (b), (c) y (d) ampliaciones sucesivas de (a). La frecuencia del forzamiento es $\omega_D/\omega_0=0.1$, la inclinación es F=1.0 ($\omega_0 \simeq 5.14980744$), una altura del potencial biestable $V_b=2U_R$ y una distancia de relajación entre los pies l=0.5

podemos obtener a 9.9 manteniendo a F_D constante y variando a ω_D .

En la figura 9.9 se muestra la velocidad promedio escalada $2\pi \langle v \rangle / \omega_D$ en función de la frecuencia del forzamiento escalada ω_D/ω_0 . Aquí se ve explícitamente los escalones donde hay enganche de la velocidad promedio escalada $2\pi \langle v \rangle / \omega_D$ con p/q, para p, q enteros. Esta figura se puede obtener a partir de un corte de la figura tridimensional 9.8 manteniendo a $F_D = 1.0$.

En la figura 9.10 se muestra la velocidad promedio escalada ahora como $2\pi \langle v \rangle / \omega_0$ (en vez del parámetro que corre ω_D) en función de la frecuencia del forzamiento escalada ω_D/ω_0 . Al lugar de escalones ahora tenemos líneas rectas cuyas pendientes corresponde al valor del enganchamiento de la velocidad promedio escalada $2\pi \langle v \rangle / \omega_D = p/q$, cuyo inverso da la localización de

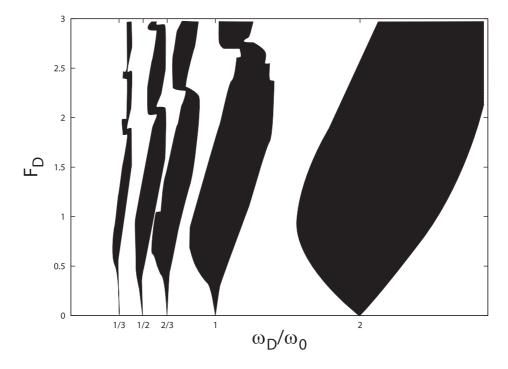


Figura 9.7: Lenguas de Arnold en el espacio de parámetros F_D contra ω_D/ω_0 . Para un inclinación de F=1 ($\omega_0 \simeq 5.14980744$), con una altura del potencial biestable $V_b=2U_R$ y una distancia de relajación entre los pies l=0.5. Las lenguas de Arnold están localizadas en los valores racionales q/p (con p, q enteros), de la frecuencia del forzamiento escalada ω_D/ω_0 .

la lengua a la que corresponde $(\omega_D/\omega_0=q/p)$. Los máximos de la velocidad promedio escalada, al igual que en los casos anteriores, están en el borde derecho de las lenguas de Arnold. Esto es cuando la velocidad promedio escalada está en una lengua, esta incremente linealmente con ω_D . Entonces, al igual que en los casos anteriores, los máximos de la velocidad promedio están asociados al fenómeno de sincronización.

Al igual que en los casos anteriores, queremos investigar la sincronización del caminante en presencia de ruido. Para ello podemos adicionar a cada ecuación de movimiento en (9.4) una componente ruidosa $\sqrt{2D}\xi^x(t)$ y $\sqrt{2D}\xi^y(t)$ respectivamente, donde $\xi^x(t)$ y $\xi^y(t)$ representan dos ruidos blancos Gaussianos delta correlacionados independientes y D es el coeficiente de difusión adimensional $(D/L^2\gamma)$.

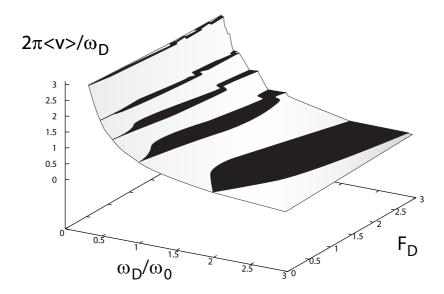


Figura 9.8: Gráfica tridimensional de la velocidad promedio escalada $2\pi \langle v \rangle / \omega_D$ en función de la amplitud de forzamiento F_D y la frecuencia de forzamiento E_D 0, para una inclinación de E_D 1, una altura del potencial biestable E_D 1 y una distancia de relajación entre los pies E_D 1.

En la figura 9.11 se muestra la velocidad promedio (ahora es un promedio temporal mas un promedio sobre un ensamble de 400 partículas) escalada $2\pi \langle v \rangle / \omega_D$ en función de la frecuencia del forzamiento escalada ω_D/ω_0 . En la línea continua se muestra el caso determinista (D=0). En la línea punteada se muestra el caso con ruido D=0.01. Podemos observar que el fenómeno de sincronización al igual que en los casos anteriores, se mantiene en la lengua 1:2, incluso en la presencia de ruido.

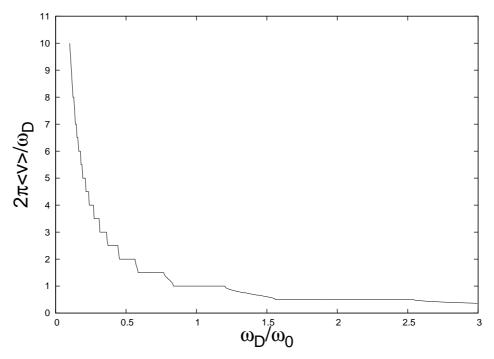


Figura 9.9: Velocidad promedio escalada $2\pi \langle v \rangle / \omega_D$ en función de la frecuencia del forzamiento escalada ω_D/ω_0 con una amplitud del forzamiento $F_D=1.0$, una inclinación de F=1 ($\omega_0 \simeq 5.14980744$), una altura del potencial biestable $V_b=2U_R$ y una distancia de relajación entre los pies l=0.5.

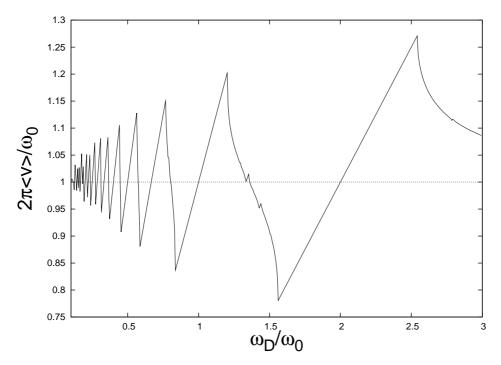


Figura 9.10: Velocidad promedio escalada ahora como $2\pi \langle v \rangle/\omega_0$ en función de la frecuencia del forzamiento escalada ω_D/ω_0 con una amplitud del forzamiento F_D =1.0. Las líneas rectas corresponde a los escalones de 9.9, para un inclinación de F=1 ($\omega_0 \simeq 5.14980744$), con una altura del potencial biestable $V_b=2U_R$ y una distancia de relajación entre los pies l=1/2.

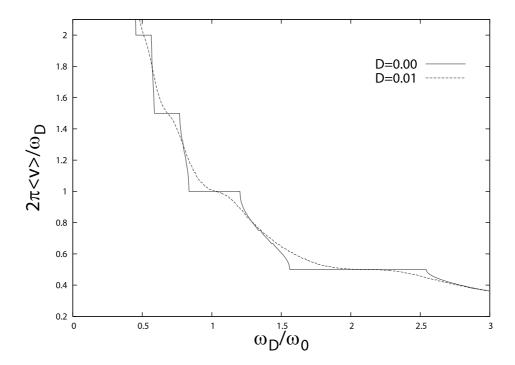


Figura 9.11: Velocidad promedio escalada $2\pi \langle v \rangle / \omega_D$ en función de la frecuencia del forzamiento escalada ω_D/ω_0 con una amplitud del forzamiento $F_D=1.0$. La línea continua muestra el caso determinista D=0.0. La línea punteada muestra el caso con ruido D=0.01. En ambos casos la inclinación es F=1 ($\omega_0 \simeq 5.14980744$), con una altura del potencial biestable $V_b=2U_R$ y una distancia de relajación entre los pies l=1/2.

Capítulo 10

Conclusión

La investigación en motores Brownianos creció enormemente en la última década, debido a la gamma de sistemas físicos y biológicos en los que estos motores Brownianos se encuentran, por ejemplo: proteínas motoras, uniones Josephson, densidad de vórtices en superconductores y sólo por mencionar algunos. Recientemente el caso determinista (temperatura cero) ha atraído una gran atención, en particular el caso inercial, ya que en general tiene una dinámica caótica que puede afectar las propiedades de trasporte del ratchet.

En este trabajo hemos analizado el fenómeno se sincronización en tres casos:

- Una partícula sobreamortiguada sobre un ratchet inclinado con forzamiento periódico.
- Una partícula inercial sobre un ratchet inclinado con forzamiento periódico.
- Dos partículas acopladas a través de un potencial biestable, sobre un ratchet inclinado y forzado periódicamente, la dinámica en este caso se caracterizó por el centro de masa de las partículas.

En los tres casos, las partículas están sujetas a la fuerza debida al ratchet, a una fuerza periódica y a una fuerza constante. La fuerza constante es necesaria para que el ratchet este inclinado, de tal forma que en ausencia de la fuerza periódica el ratchet inclinado tenga una frecuencia característica.

Introducimos una fase lineal a través de un conjunto de tiempos determinados por la ocurrencia de saltos entre pozos del potencial ratchet, y mostra-

mos que la frecuencia promedio asociada a la fase lineal del ratchet inclinado puede ser sincronizada con la frecuencia del forzamiento periódico.

En todos los casos se obtuvieron lenguas de Arnold bien definidas en el espacio de parámetros bidimensional, dado por la amplitud y la frecuencia del forzamiento periódico. Cada lengua de Arnold está etiquetada por un número racional p/q (sincronización p:q), donde p y q son dos números enteros, cuyo valor da la velocidad promedio normalizada $2\pi < v > /\omega_D$ y su inverso nos dice la posición de las lenguas.

Se obtuvo una estructura autosimilar para la velocidad promedio en función de la amplitud del forzamiento. Pero sólo para los casos sobre amortiguados (a) y (c) se obtuvo una estructura fractal tipo escalera del diablo.

Se mostró que los máximos de la velocidad promedio escalada corresponden a los bordes de las lenguas Arnold, con lo cual se estableció una conexión entre el transporte óptimo en ratchets inclinados y el fenómeno de sincronización.

Se estudio brevemente el efecto del ruido sobre la sincronización del ratchet inclinado y se obtuvo que para ruidos pequeños comparados con la altura del potencial, el fenómeno de sincronización se mantiene para las lenguas de Arnold más anchas.

Bibliografía

- [1] Luca Gammaitoni, Peter Hänggi, Peter Jung, y Fabio Marchesoni: *Rev Mod Phys*, **70** (1998), 223.
- [2] R. D. Astumian, y F. Moss: Chaos, 8 (1998), 533.
- [3] P. Hänggi: Chem Phys Chem, **3** (2002), 285.
- [4] H. Linke: Appl Phys A, **75** (2002), 167.
- [5] R. D. Astumian, y P. Hänggi: *Physics Today*, **55** (2002), 33.
- [6] P. Reimann, y P. Hänggi: Appl Phys A, **75** (2002), 169.
- [7] P. Reimann: Phys Rep, **361** (2002), 57.
- [8] R. D. Vale, y R. A. Milligan: *Science*, **288** (2000), 88.
- [9] J. Howard: Mechanics of Motor Proteins and the Cytoskeleton, Sinauer Press, 2001.
- [10] J. Klafter, y M. Urbakh: J Phys: Condens Matter, 17 (2005).
- [11] M. Borromeo, y F. Marchesoni: Chaos, 15 (2005), 026110.
- [12] A. Pikovsky, M. Rosenblum, y J. Kurths: Synchronization, A universal concept in nonlinear sciences, Cambridge University Press, 2001.
- [13] H. Risken: The Fokker-Planck Equation, Springer-Verlag, 1989.
- [14] P. Reimann, M. Grifoni, y P. Hänggi: Phys Rev Lett, **79** (1997), 10.
- [15] C. S. Lee, et al.: *Nature*, **400** (1999), 337.

- [16] Clécio C. de Souza Silva, J. Van de Vondel, B. Y. Zhu, M. Morelle, y V. V. Moshchalcov: Phys Rev B, 73 (2006), 014507.
- [17] T. Hugel, N. B. Holland, A. Cattani, L. Moroder, M. Seitz, y H. E. Gaub: Science, 296 (2002), 1103.
- [18] R. Bartussek, P. Hänggi, y J. G. Kissner: Europhys Lett, 28 (1994), 459.
- [19] A. Ajdari, L. Peliti D. Mukamel, y J. Prost: J Phys I France, 4 (1994), 1551.
- [20] P. Hänggi, y R. Bartussek: Non Linear Physics of Complex Systems, tomo 476, Springer, 1996.
- [21] P. Jung, J. G. Kissner, y P. Hänggi: Phys Rev Lett, **76** (1996), 3436.
- [22] J. L. Mateos: Phys Rev Lett, 84 (2000), 258.
- [23] J. L. Mateos: Acta Phys Polonica, **32** (2001), 307.
- [24] J. L. Mateos: *Physica D*, **168** (2002), 205.
- [25] J. L. Mateos: *Physica A*, **325** (2003), 92.
- [26] Clécio C. de Souza Silva, Joris Van de Vondel, Mathieu Morelle, y Victor V. Moshchalcov: *Nature*, **440** (2006), 651.
- [27] L. Glass: *Nature*, **410** (2001), 277.
- [28] S. Boccaletti, J. Kurths, G. Osipov, D. L. Valladares, y C. S. Zhou: *Phys Rep*, **366** (2002), 1.
- [29] J. A. Acebrón, L. L. Bonilla, C. J. Pérez Vicente, F. Ritort, y R. Spigler: Rev Mod Phys, 77 (2005), 137.
- [30] U. E. Vincent, Njah A., O. Akimalde, y A. R. T. Solarin: Chaos, 14 (2004), 1018.
- [31] U. E. Vincent, A. Kenfack, Njah A., y O. Akimalde: *Phys Rev E*, **72** (2005), 056213.

- [32] U. E. Vincent, Njah A., O. Akimalde, y A. R. T. Solarin: *Physica A*, **360** (2006), 186.
- [33] D. G. Zarlenga, H. A. Larrondo, C. M. Arizmendi, y F. Family: *Physica A*, 352 (2005), 282.
- [34] M. Kostur, P. Hänggi, P. Talkner, y J. L. Mateos: Phys Rev E, 72 (2005), 036210.
- [35] A. Einstein: Ann Phys (Leipzig), 17 (1905), 549.
- [36] M. von Smoluchowsky: Ann Phys (Leipzig), **21** (1906), 756.
- [37] F. Reif: Fundamentals of statistical and thermal physics, McGraw-Hill, 1976.
- [38] A. E. Siegman: Am J Phys, 47 (1978), 545.
- [39] C.W. Gardiner: *Handbook of Stochastic Methods*, Springer, 2^a ed^{ón}., 1985.
- [40] Riccardo Mannella: International Journal of Modern Physics C, 13 (2002), 1177.
- [41] H. S. Leff, y A. F. Rex: Maxwell's Demon, Entropy, Information, Computing, Bristol, 1990.
- [42] R.P. Feynman, R. B. Leighton, y M. Sands: The Feynman Lectures on Physics, Addison-Wesley, 1963.
- [43] A. Ajdari, y J. Prost: C R Acad Sci Paris, **35** (1992), 1635.
- [44] M. O. Magnasco: Phys Rev Lett, **71** (1993), 1477.
- [45] M. O. Magnasco: Phys Rev Lett, **72** (1994), 2656.
- [46] C. R. Doering, W. Horsthemke, y J. Riordan: Phys Rev Lett, 72 (1994), 3436.
- [47] M. M. Millonas, y M. I. Dykman: Phys Lett A, 185 (1994), 65.
- [48] J. Prost, J. F. Chauwin, L. Peliti, y A. Ajdari: Phys Rev Lett, 72 (1994), 2652.

- [49] R. D. Astumian, y M. Bier: Phys Rev Lett, 72 (1994), 1766.
- [50] C. S. Peskin, y G. Oster: *Biophys J*, **68** (1995), 202.
- [51] J. Rousselet, L. Salome, A. Ajadari, y J. Prost: Nature (London), 79 (1997), 10.
- [52] H. Linke, et al.: Europhys Lett, 44 (1998), 343.
- [53] I. Zapata, et al.: Phys Rev Lett, 77 (1996), 2292.
- [54] F. Falo, et al.: Europhys Lett, 45 (1999), 700.
- [55] C. Mennerat-Robilliard, et al.: Phys Rev Lett, 82 (1999), 851.
- [56] P. Reimann, R. Bartussek, R. Haussler, y P. Hänggi: Phys Lett A, 215 (1996), 26.
- [57] Emilio Cortés: *Physica A*, **275** (2000), 78.
- [58] J. Luczka, R. Bartussek, y P. Hänggi: Europhys Lett, **31** (1995), 431.
- [59] P. Hänggi, Fabio Marchesoni, y Nori F.: Ann Phys (Leipzig), 14 (2005), 51.
- [60] M. O. Magnasco: Phys Rev Lett, **71** (1993), 1551.
- [61] J. F. Chauwin, A. Ajdari, y J. Prost: Europhys Lett, **32** (1995), 373.
- [62] R. Bartussek, P. Reimann, y P. Hänggi: Phsy Rev Lett, 76 (1996), 1166.
- [63] Baoquan Ai, et al.: Phys Rev E, **72** (2005), 031101.
- [64] C. Kettner, P. Reimann, P. Hänggi, y F. Müller: *Phys Rev E*, **61** (2000), 312.
- [65] Grigory V. Osipov, Arkady S. Pikovsky, y Jürgen Kurths: Phys Rev Lett, 88 (2002), 054102.
- [66] Jan A. Freund, Lutz Schimansky-Geier, y Peter Hänggi: *Chaos*, **13** (2002), 225.

- [67] Jesús Casado-Pascual, José Gómez-Ordoñes, Manuel Morillo, Jörg Lehmann, Igor Goychuck, y Peter Hänggi: *Phys Rev E*, **71** (2005), 011101.
- $[68]\,$ M. Borromeo, G. Constantini, y F. Marchesoni: Phys Rev E, ${\bf 65}$ (2002), 041110.
- [69] S. A. Tatarkova, W. Sibbett, y K. Dholakia: Phys Rev Lett, 91 (2003), 038101.
- [70] B. Lindner, J. Garía-Ojalvo, A.Ñeiman, y L. Schimansky-Geier: *Phys Rep*, **392** (2004), 321.
- [71] K. Lindenberg, A. M. Lacasta, J. M. Sancho, y A. H. Romero: New J Phys, 7 (2005), 29.
- [72] A. M. Lacasta, J. M. Sancho, A. H. Romero, y K. Lindenberg: Phys Rev Lett, 94 (2005), 160601.
- [73] R. Guantes, y S. Miret-Artés: Phys Rev E, 67 (2003), 046212.
- [74] S. Sengupta, R. Guantes, S. Miret-Artés, y P. Hänggi: *Physica A*, **338** (2004), 406.
- [75] C. Reichhardt, C. J. Olson Reichhardt, y M. B. Hastings: *Phys Rev E*, 69 (2004), 056115.
- [76] S. Savelév, V. Misko, F. Marchesoni, y Nori F.: Phys Rev B, 71 (2005), 214303.
- [77] T. Bohr., P. Bak, y M. H. Jensen: Phys Rev A, 30 (1984), 1970.
- [78] M. Borromeo, G. Constantini, y F. Marchesoni: *Phys Rev Lett*, **82** (1999), 2820.
- [79] R. L. Kautz: Re Prog Phys, **59** (1996), 935.
- [80] F. R. Alatriste, y J. L. Mateos: *Physica A*, **372** (2006), 263.
- [81] M. H. Jensen, P. Bak, y T. Bohr: Phys Rev A, 30 (1984), 1960.
- [82] C. Reichhardt, y Nori F.: Phys Rev Lett, 82 (1999), 414.

- [83] S. Flach, O. Yevtushenko, y Y. Zolotaryuk: *Phys Rev Lett*, **84** (2000), 2358.
- [84] S. Denisov, y S. Flach: Phys Rev E, **64** (2001), 056236.
- [85] S. Denisov: Phys Lett A, **296** (2002), 197.
- [86] M. Barbi, y M. Salerno: Phys Rev E, **62** (2000), 1988.
- [87] M. Barbi, y M. Salerno: Phys Rev E, 63 (2001), 066212.
- [88] H. A. Larrondo, Fereydoon Family, y C.M. Arizmendi: *Physica A*, **303** (2002), 67.
- [89] S. Cilla, F. Falo, y L. M. Floría: Phys Rev E, 63 (2001), 031110.
- [90] G. Carapella: Phys Rev B, **63** (2001), 054515.
- [91] G. Carapella, y G. Costabile: Phys Rev Lett, 87 (2001), 077002.
- [92] E. Goldobin, A. Sterck, y D. Koelle: Phys Rev E, 63 (2001), 031111.
- [93] G. Carapella, G. Costabile, N. Martucciello, M. Cirillo, R. Latempa, A. Polcari, y G. Filatrella: *Physica C*, **382** (2002), 337.
- [94] Franco Nori: Nature Phys, 2 (2006), 227.
- [95] R. Salgado-García, M. Aldana, y G. Matínez-Mekler: Phys Rev Lett, 96 (2006), 134101.
- [96] M. Kostur, Lukasz Manchura, P. Hänggi, Jerzy Luczka, y P. Talkner: Physica A, 371 (2006), 928.
- [97] Hongbin Chen, et al.: Phys Rev E, **71** (2005), 031102.
- [98] G. L. Baker, y J. P. Gollub: *Chaotic Dynamics, an Introduction*, Cambridge University Press, 2^a ed^{ón}., 1996.
- [99] William H. Press, Brian P. Flannery, Saul A. Teukolsky, y William T. Vetterling: Numerical Recipes in FORTRAN 77, Cambridge University Press, 1992.
- [100] R. D. Astumian: Science, **276** (1997), 917.

- [101] I. Derényi, y T. Vicseck: Proc Natl Acad Sci USA, 93 (1996), 6776.
- [102] G. Stratopoulos, T. E. Dialynas, y G. P. Tsironis: Phys Rev A, 252 (1999), 151.
- [103] S. Klumpp, A. Mielke, y C. Wald: *Phys Rev E*, **63** (2001), 031914.
- [104] T. C. Elston, d. You, y C. S. Peskin: SIAM J Appl Math, 61 (2000), 776.
- [105] M. Bier: Phys Rev Lett, **91** (2003), 148104.
- [106] R. Kanada, y K. Sasaki: Phys Rev E, 67 (2003), 061917.
- [107] J. L. Mateos, Neiman, F. Moss, J. A. Freund, L. Schimansky-Geier, y I. M. sokolov: en «Proc. of SPIE», , (eds.) Schimansky-Geier, D. Abbot, Neiman, y C. Van de Broeck, 2003, tomo 5114, 20.
- [108] J. L. Mateos, Neiman, y F. Moss: en «AIP Conference Proceedings», , (ed.) S. M. Bezrukov, 2003, 569.
- [109] J. L. Mateos: Fluctuation and Noise Letters, 4 (2004), L161.
- [110] J. L. Mateos: *Physica A*, **351** (2005), 79.