



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

---

Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas

---

Estudio teórico de caminatas aleatorias  
en presencia de campos externos débiles

Tesis presentada al

**Posgrado en Ciencias Física Aplicada**

como requisito parcial para la obtención del grado de

**Doctor en Ciencias con especialidad en Física Aplicada**

por

Jhony Eredi Ramírez Cancino

asesorado por

Dr. José Noé Felipe Herrera Pacheco y

Dr. Mario Iván Martínez Hernández

Puebla, Pue. Mayo 2016

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

---

Facultad de Ciencias Fisico-Matemáticas

---

Estudio teórico de caminatas aleatorias en presencia de  
campos externos débiles

Tesis presentada al

**Colegio de Física**

como requisito parcial para la obtención del grado de

**Doctor en Ciencias con especialidad en Física Aplicada**

por

Jhony Eredi Ramírez Cancino

asesorado por

Dr. José Noé Felipe Herrera Pacheco y Dr. Mario Iván Martínez  
Hernández

Puebla Pue.



**Título:** Estudio teórico de caminatas aleatorias en presencia de campos externos débiles

**Estudiante:** Jhony Eredi Ramírez Cancino

## COMITÉ

---

Dr. Hugo Adán Cruz Suárez  
Presidente

---

Dr. Manuel Martín Ortiz  
Vocal externo

---

Dr. Jorge Velázquez Castro  
Secretario

---

Dr. Víctor Hugo Vázquez Guevara  
Suplente

---

Dr. Alexandra Deriabina  
Vocal

---

Dr. J. Noé F. Herrera Pacheco  
Asesor

---

Dr. Pavel Castro Villarreal  
Vocal Externo

---

Dr. M. Iván Martínez Hernandez  
Asesor



“When I heard the learn’d astronomer,  
When the proofs, the figures, were ranged in columns  
before me,  
When I was shown the charts and diagrams, to add,  
divide, and measure them,  
When I sitting heard the astronomer where he lectured  
with much applause in the lecture-room,  
How soon unaccountable I became tired and sick,  
Till rising and gliding out I wander’d off by myself,  
In the mystical moist night-air, and from time to time,  
Look’d up in perfect silence at the stars.”

Walt Whitman



# Agradecimientos

En primer lugar quiero agradecer a mis asesores, Dr. Noé Herrera Pacheco y Dr. Iván Martínez por el apoyo académico y el tiempo que dedicaron para que pudiera salir avante con esta investigación. A mis amigos, Bogar y Miguel, por sus comentarios oportunos. Agradezco sinceramente a Eric Martínez, Raúl Brito y Jorge Velázquez por su tiempo brindado para las discusiones fructíferas y observaciones puntuales sobre este trabajo. También agradezco a CONACyT por el apoyo brindado a través de la beca No. 339193 para que pudiera realizar mis estudios de doctorado. Agradezco a los miembros del jurado sus correcciones y comentarios a este trabajo, ya que eso ha permitido mejoras significativas al mismo.

Así mismo, se hace patente el agradecimiento a la VIEP-BUAP por el apoyo en la impresión de esta tesis.



# Índice general

Lista de figuras	III
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
Bibliografía	8
<b>2. Introducción al formalismo de integrales de trayectoria</b>	<b>9</b>
2.1. Integral de trayectoria para caminatas aleatorias simples	11
2.1.1. La probabilidad de transición	12
2.2. Función de Green y la acción para un RW	14
Bibliografía	17
<b>3. El RW en presencia de un campo externo débil</b>	<b>19</b>
3.1. La función de Green y la integral de trayectoria	20
3.2. Condición de normalización para $P_V$	22
3.3. Función generadora de momentos	23
3.4. Aplicaciones	24
3.4.1. Ejemplo 1: Potencial $V(x) = \kappa x$	25
3.4.2. Ejemplo 2: Potencial $V(x) = \kappa x^2$	29
3.4.3. Ejemplo 3: Potencial $V(x) = \kappa x^4$	32
3.4.4. Ejemplo 4: Potencial con decaimiento exponencial	35
3.4.5. Ejemplo 5: Potencial sinusoidal	36
Bibliografía	41
<b>4. El RW con superposición de fuerzas</b>	<b>43</b>
4.1. $P_V$ para una superposición de fuerzas conservativas	43
4.2. Proceso de Ornstein-Uhlenbeck	46
4.2.1. $P_V$ para el proceso de Ornstein-Uhlenbeck	46
4.2.2. Valores promedio y comportamientos asintóticos	47
4.3. Potencial 2-4	50
4.3.1. $P_V$ para el potencial 2-4	51

4.3.2. Valores promedio y comportamientos asintóticos . . .	54
4.4. Potencial seno+seno . . . . .	55
4.4.1. $P_V$ para el potencial seno+seno . . . . .	57
4.4.2. Valores promedio y comportamientos asintóticos . . .	59
Bibliografía . . . . .	65
<b>5. El <i>ratchet</i></b>	<b>67</b>
5.1. Potencial de <i>rocking</i> . . . . .	69
5.2. Potencial de <i>ratchet</i> triangular . . . . .	70
5.3. Las trayectorias del <i>ratchet</i> . . . . .	71
Bibliografía . . . . .	83
<b>6. Conclusiones</b>	<b>85</b>
Bibliografía . . . . .	91
<b>A. Solución exacta de los potenciales lineal y cuadrático</b>	<b>93</b>
A.1. Potencial $V(x) = \kappa x$ . . . . .	93
A.2. Potencial $V(x) = kx^2$ . . . . .	95
<b>B. Solución del potencial lineal y cuadrático en <math>d</math>- dimensiones</b>	<b>97</b>
B.1. Potencial lineal . . . . .	97
B.2. Potencial cuadrático . . . . .	98
<b>C. Enfoque hamiltoniano</b>	<b>101</b>
<b>Artículo publicado</b>	<b>103</b>

# Índice de figuras

3.1.	Comparación entre $P$ y $P_V$ para un potencial lineal . . . . .	26
3.2.	Comportamiento asintótico de $E_{P_V}(X)$ para un potencial lineal . . . . .	28
3.3.	Comportamiento asintótico de $E_{P_V}(X)$ para un potencial lineal para diferentes $x_0$ . . . . .	29
3.4.	Máximos de $P$ y $P_V$ para un potencial lineal . . . . .	30
3.5.	Comparación entre $P$ y $P_V$ para un potencial tipo oscilador armónico . . . . .	31
3.6.	Comparación entre $P$ y $P_V$ para un potencial cuártico . . . . .	34
3.7.	Comparación entre $P$ y $P_V$ para un potencial sinusoidal . . . . .	38
3.8.	Primer momento de $P_V$ para un potencial sinusoidal . . . . .	39
4.1.	Comparación entre $P$ y $P_V$ para el proceso de O-U . . . . .	48
4.2.	Evolución temporal de $P_V$ para el proceso de O-U . . . . .	49
4.3.	Comportamiento asintótico de $E_{P_V}(X)$ para el proceso de O-U . . . . .	50
4.4.	Comportamiento asintótico de $MSD_{P_V}$ para el proceso de O-U . . . . .	51
4.5.	Potencial 2-4 para $B = 1$ y diferentes valores de $A$ . . . . .	52
4.6.	Comparación entre $P$ y $P_V$ para el proceso de O-U . . . . .	53
4.7.	Evolución temporal de $P_V$ para el potencial 2-4 . . . . .	54
4.8.	Comportamiento asintótico de $E_{P_V}(X)$ para el potencial 2-4 . . . . .	55
4.9.	Comportamiento asintótico de $MSD_{P_V}$ para el potencial 2-4 . . . . .	56
4.10.	Potencial seno+seno en unidades adimensionales . . . . .	57
4.11.	$\mathcal{N}^{-1}$ como función de $x_0$ y $t$ para el potencial seno+seno . . . . .	58
4.12.	Evolución temporal de $P_V$ para el potencial seno+seno . . . . .	59
4.13.	Evolución temporal de $P_V$ para el potencial seno+seno . . . . .	61
4.14.	Evolución temporal de $E_V(X)$ para el potencial seno+seno . . . . .	62
5.1.	Mecanismo de <i>rocking</i> en el potencial de <i>ratchet</i> . . . . .	69
5.2.	Potencial de <i>ratchet</i> triangular . . . . .	71
5.3.	Muestra de trayectorias <i>ratchets</i> con diferentes $D$ . . . . .	75

5.4. Trayectoria promedio del <i>ratchet</i> . . . . .	76
5.5. Detalles de las trayectorias promedio del <i>ratchet</i> . . . . .	76
5.6. Densidad de probabilidad para las trayectorias del <i>ratchet</i> .	77
5.7. MSD para las trayectorias del <i>ratchet</i> . . . . .	77

# Capítulo 1

## Introducción

En el verano de 1827 el botánico Robert Brown descubrió bajo su microscopio el movimiento vigoroso e irregular de pequeñas partículas (originalmente de polen) que flotaban en el agua, también observó que pequeñas partículas de minerales se someten a un movimiento incesante, como si éstos fueran objetos vivos [1.1, 1.2]. Ese maravilloso descubrimiento es conocido como Movimiento Browniano, en honor a su descubridor. Este descubrimiento dejó maravillado a muchos científicos de esa época, aunque no pudieron dar una explicación en términos de un modelo físico. La idea de combinar tal movimiento con el movimiento molecular se extendió en la última mitad del siglo XIX cuando las ideas atomistas aún no eran del todo aceptadas como una realidad física. Fue hasta 1905, con el trabajo convincente de Albert Einstein, que se tuvo una explicación teórica de tal fenómeno que podría ser verificada cuantitativamente mediante experimentos, estableciéndose como una base fundamental de la teoría atómica de la materia [1.3, 1.4].

Einstein demostró que la constante de difusión  $D$  de una partícula browniana se encuentra relacionado con su movilidad  $\mu$  a través de  $D = \mu kT$ . Esta relación, la cual es llamada la relación de Einstein, nos provee una conexión que permite relacionar el movimiento de las partículas brownianas con el movimiento térmico molecular del medio.

Las fluctuaciones estocásticas que se observan en el movimiento browniano de una partícula coloidal sumergida en un medio líquido surgen del hecho de que los fluidos están compuestos por moléculas con posiciones y momentos aleatorios [1.5, 1.6]. Una forma de modelar el movimiento probabilístico de la partícula coloidal se hace capturando las fluctuaciones térmicas usando directamente los cálculos a nivel de cada partícula, incluso usando la aproximación de granos grandes [1.7–1.9], el precio que

se tiene que pagar es el excesivo tiempo computacional debido a que la dinámica individual de cada molécula es mucho más rápida para hacer algún cálculo aproximado de alguna de las cantidades que caracterizan a este sistema, que los tiempos de la escala hidrodinámica [1.10]. Alternativamente, las fluctuaciones térmicas pueden ser incluidas en la ecuación de Navier-Stokes a través de considerar que la fuerza contiene términos estocásticos, como fue propuesto por Landau y Lifshitz [1.11]. La idea básica de las fluctuaciones en hidrodinámica [1.12] es que son generadas por la adición de un tensor de esfuerzo estocástico al tensor de estrés de viscosidad usual [1.13]. Se ha demostrado que este modelo arroja resultados bastante buenos esencialmente a escalas moleculares [1.9, 1.14–1.18]. Este escrito no pretende ser en ningún nivel una recopilación sobre los métodos tradicionales para el estudio del Movimiento Browniano, si el lector desea revisar material al respecto, le sugerimos consultar las siguientes refs. [1.19–1.22].

Otro modelo estocástico del Movimiento Browniano consiste en considerar que la partícula coloidal construye su trayectoria a partir de brincos aleatorios e independientes de acuerdo a una probabilidad de transición local y por lo general se asume algún tipo de evolución clásica caótica de tal forma que la probabilidad de transición se calcula a través de un promedio de todas las posibles trayectorias [1.23].

El formalismo de los métodos de la integral de trayectoria para la mecánica cuántica fue introducido por Richard P. Feynman en 1948 [1.24], su importancia radica en el hecho de que es utilizada ampliamente en la física teórica. Sus aplicaciones en la mayoría de las áreas de la física moderna provee una nueva forma de resolver los problemas existentes pero también sirve como guía para la formulación, desarrollo de nuevas ideas y aproximaciones en la descripción de muchos fenómenos físicos [1.25].

Este último formalismo nos permite tener un procedimiento estandar de cuantización basado en la existencia de una hamiltoniana o lagrangiana para el sistema de interés, que satisface la condición que a  $\hbar$  tendiendo a cero se obtienen las ecuaciones de movimiento clásicas, esto porque la integral de trayectoria está definida por una acción integral estacionaria [1.26]. En este sentido, es posible tener una teoría que envuelve ecuaciones disipativas para un sistema cuántico, en particular dicha teoría puede reproducir las ecuaciones clásicas del Movimiento Browniano en el límite adecuado [1.27, 1.28]. Por otro lado, la ecuación de Langevin frecuentemente es usada como una de las bases para la teoría del Movimiento Browniano, sin embargo, tal como sucede con cualquier otra ecuación fenomenológica, la ecuación de Langevin tiene un rango de validéz limitado. Es razonable usar la ecuación

de Langevin cuando estemos interesados en estudiar el comportamiento asintótico para tiempos largos del sistema. “Tiempos largos” se entiende como la escala de tiempo en la que el tiempo del proceso se compara con el tiempo de relajación del baño térmico acoplado al sistema, en este caso, no necesitamos una descripción a nivel cuántico ya que sus efectos sobre las partículas macroscópicas en un medio viscoso pueden ser explicadas por una teoría clásica [1.27]. A través de la integral de trayectoria, la acción clásica que le corresponde a un caminante aleatorio resulta ser justo la acción de una partícula libre en el contexto de la mecánica clásica [1.25, 1.26, 1.29, 1.30]. Denotaremos a las caminatas aleatorias por RW del inglés random walker. En el caso particular de considerar una caminata aleatoria simple se usará RWs.

El objetivo principal de este trabajo consiste en desarrollar un formalismo teórico para determinar la probabilidad de transición de un RW inmerso en un medio donde hay un campo externo representado por una función de energía potencial  $V(x)$  acoplado al medio molecular como una perturbación al mismo, sin la necesidad de recurrir a los métodos tradicionales que dan las soluciones de las ecuaciones de Langevin y Fokker-Planck. Para esto, usaremos el hecho de que la acción que le corresponde a un RWs bajo la integral de trayectoria corresponde al de una partícula libre en el contexto de mecánica clásica [1.25, 1.29, 1.30]. Consideraremos una perturbación debido a una fuerza conservativa que es generada por un potencial  $V(\mathbf{x})$  y que la lagrangiana para este nuevo sistema es  $\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 - \epsilon V$  [1.31, 1.32], donde  $\epsilon$  es la constante de acoplamiento perturbativo y  $\mathcal{L}_0$  es la energía cinética para una partícula libre. Entonces, usando los métodos de la integral de trayectoria es posible tener una aproximación de la probabilidad de transición para un proceso estocástico con tendencia. Estos resultados también son aplicados para obtener una aproximación de la función generadora de momentos y los momentos, en particular, para obtener información sobre la posición promedio y el desplazamiento cuadrático medio del proceso perturbado.

Esta tesis se encuentra organizada de la siguiente manera: En el Capítulo 2 se parte del análisis de los RW en redes hipercúbicas para encontrar la probabilidad de transición de un RW en un medio continuo. Además, se escribe la acción que le corresponde a un RWs, que es la acción de una partícula libre, siendo éste el resultado fundamental del que partimos para la construcción de nuestro formalismo. En el Capítulo 3 desarrollamos el formalismo para determinar la probabilidad de transición para un proceso estocástico inmerso en un potencial  $V(x)$  que perturba la acción de una

partícula libre, de esta forma, a través de la integral de trayectoria somos capaces de tener una expresión de tal probabilidad. Con esta aproximación, determinamos la función generadora de momentos y analizamos las desviaciones del primer momento (posición promedio del proceso) y el desplazamiento cuadrático medio del proceso perturbado respecto del proceso libre en sus comportamientos a tiempos cortos y largos. Aplicamos este formalismo a los potenciales lineal, cuadrático, cuártico, exponencial y sinusoidal. En el Capítulo 4 describimos la probabilidad de transición cuando un RW se encuentra inmerso en un potencial que es el resultado de la suma de varios potenciales. El objetivo fundamental de este capítulo es escribir la probabilidad de transición de este proceso en función de las probabilidades de transición de cada potencial que lo compone. En particular, aplicamos estos resultados para describir el proceso de Ornstein-Uhlenbeck, potencial 2-4 y el potencial seno+seno. En el Capítulo 5, aplicamos los resultados obtenidos en el Capítulo 3 sobre el potencial lineal para construir un sistema *ratchet*. Analizaremos las características fundamentales de las trayectorias del *ratchet*, tal como la posición promedio y el desplazamiento cuadrático medio en el límite de tiempo cortos y largos. Finalmente, en el Capítulo 6 escribimos las conclusiones generales de este trabajo, también se discuten algunas consecuencias y perspectivas del mismo.

# Bibliografía

- [1.1] R. Brown, “[XXVII. A brief account of microscopical observations made in the months of June, July and August 1827, on the particles contained in the pollen of plants; and on the general existence of active molecules in organic and inorganic bodies,](#)” *The Philosophical Magazine, or Annals of Chemistry, Mathematics, Astronomy, Natural History and General Science*, vol. 4, no. 21, pp. 161–173, 1828.
- [1.2] R. Brown, “[XXIV. additional remarks on active molecules,](#)” *The Philosophical Magazine, or Annals of Chemistry, Mathematics, Astronomy, Natural History, and General Science*, vol. 6, no. 33, pp. 161–166, 1829.
- [1.3] A. Einstein, “[Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen,](#)” *Annalen der physik*, vol. 322, no. 8, pp. 549–560, 1905.
- [1.4] A. Einstein, “[Eine neue bestimmung der moleküldimensionen,](#)” *Annalen der Physik*, vol. 324, no. 2, pp. 289–306, 1906.
- [1.5] R. Kubo, M. Toda, and N. Hashitsume, *Statistical Physics II: Nonequilibrium Statistical Mechanics*. Springer Series in Solid-State Sciences, Springer Berlin Heidelberg, 2012.
- [1.6] R. Kubo, “[The fluctuation-dissipation theorem,](#)” *Reports on progress in physics*, vol. 29, no. 1, p. 255, 1966.
- [1.7] H. Noguchi, N. Kikuchi, and G. Gompper, “[Particle-based mesoscale hydrodynamic techniques,](#)” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 78, no. 1, p. 10005, 2007.

- [1.8] A. Donev, B. J. Alder, and A. L. Garcia, “[Stochastic hard-sphere dynamics for hydrodynamics of nonideal fluids](#),” *Physical review letters*, vol. 101, no. 7, p. 075902, 2008.
- [1.9] A. Donev, J. B. Bell, A. de La Fuente, and A. L. Garcia, “[Diffusive transport by thermal velocity fluctuations](#),” *Physical review letters*, vol. 106, no. 20, p. 204501, 2011.
- [1.10] S. Delong, F. B. Usabiaga, R. Delgado-Buscalioni, B. E. Griffith, and A. Donev, “[Brownian dynamics without Green’s functions](#),” *The Journal of chemical physics*, vol. 140, no. 13, p. 134110, 2014.
- [1.11] L. Landau and E. Lifshitz, *Fluid Mechanics*. No. v. 6, Elsevier Science, 2013.
- [1.12] J. de Zarate and J. Sengers, *Hydrodynamic Fluctuations in Fluids and Fluid Mixtures*. Elsevier Science, 2006.
- [1.13] H. Öttinger, *Beyond Equilibrium Thermodynamics*. Wiley, 2005.
- [1.14] A. Donev, J. B. Bell, A. De la Fuente, and A. L. Garcia, “[Enhancement of diffusive transport by non-equilibrium thermal fluctuations](#),” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2011, no. 06, p. P06014, 2011.
- [1.15] B. Z. Shang, N. K. Voulgarakis, and J.-W. Chu, “[Fluctuating hydrodynamics for multiscale simulation of inhomogeneous fluids: Mapping all-atom molecular dynamics to capillary waves](#),” *The Journal of chemical physics*, vol. 135, no. 4, p. 044111, 2011.
- [1.16] N. K. Voulgarakis and J.-W. Chu, “[Bridging fluctuating hydrodynamics and molecular dynamics simulations of fluids](#),” *The Journal of chemical physics*, vol. 130, no. 13, p. 134111, 2009.
- [1.17] B. Z. Shang, N. K. Voulgarakis, and J.-W. Chu, “[Fluctuating hydrodynamics for multiscale modeling and simulation: Energy and heat transfer in molecular fluids](#),” *The Journal of chemical physics*, vol. 137, no. 4, p. 044117, 2012.
- [1.18] A. Donev, A. Nonaka, Y. Sun, T. Fai, A. Garcia, and J. Bell, “[Low mach number fluctuating hydrodynamics of diffusively mixing fluids](#),” *Communications in Applied Mathematics and Computational Science*, vol. 9, no. 1, pp. 47–105, 2014.

- [1.19] M. Bazant, *Notas de curso: Random Walks and Diffusion*. MIT, 2006.
- [1.20] W. Coffey and Y. Kalmykov, *The Langevin Equation: With Applications to Stochastic Problems in Physics, Chemistry and Electrical Engineering*. World Scientific Series in Contemporary Chemical Physics, World Scientific Publishing Company, 2012.
- [1.21] G. Pavliotis, *Stochastic Processes and Applications: Diffusion Processes, the Fokker-Planck and Langevin Equations*. Texts in Applied Mathematics, Springer New York, 2014.
- [1.22] H. Risken, *The Fokker-Planck Equation: Methods of Solution and Applications*. Springer Series in Synergetics, Springer Berlin Heidelberg, 2012.
- [1.23] J. Duda, “From maximal entropy random walk to quantum thermodynamics,” *arXiv preprint arXiv:1111.2253*, 2011.
- [1.24] R. P. Feynman, “Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 20, no. 2, p. 367, 1948.
- [1.25] M. Chaichian and A. Demichev, *Path Integrals in Physics: Volume II Quantum Field Theory, Statistical Physics and other Modern Applications*. Institute of physics series in mathematical and computational physics, Taylor & Francis, 2001.
- [1.26] S. Brush, “Functional integrals and statistical physics,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 33, no. 1, p. 79, 1961.
- [1.27] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, “Path integral approach to quantum Brownian motion,” *Physica A: Statistical mechanics and its Applications*, vol. 121, no. 3, pp. 587–616, 1983.
- [1.28] R. Zwanzig, “Nonlinear generalized Langevin equations,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 9, no. 3, pp. 215–220, 1973.
- [1.29] E. Santos, “Interpretation of Feynman formalism of quantum mechanics in terms of probabilities of paths,” *arXiv preprint arXiv:1210.2210*, 2012.

- [1.30] C. Itzykson and J. Drouffe, *Statistical Field Theory: Volume 1, From Brownian Motion to Renormalization and Lattice Gauge Theory*. Cambridge Monographs on Mathematical Physics, Cambridge University Press, 1991.
- [1.31] M. Calkin, *Lagrangian and Hamiltonian Mechanics*. Allied Publishers, 1996.
- [1.32] H. Goldstein, C. Poole, and J. Safko, *Classical Mechanics*. Addison Wesley, 2002.

## Capítulo 2

# Introducción al formalismo de integrales de trayectoria

La característica más cautivadora de las técnicas de la integral de trayectoria es que provee un mismo enfoque para resolver problemas en diferentes áreas de la física teórica, tal como en la teoría de procesos estocásticos, mecánica cuántica, teoría cuántica de campos, teorías de cuerdas y en general de la mecánica estadística [2.1].

De hecho, la forma general de la probabilidad de transición  $P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0)$  en la teoría de procesos estocásticos es

$$P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) \sim \sum_{\substack{\text{todas las} \\ \text{trayectorias} \\ \text{de } \mathbf{x}_0 \text{ a } \mathbf{x}}} \exp \left\{ -\frac{1}{D} F[\mathbf{x}(\tau)] \right\} \quad (2.1)$$

donde  $\mathbf{x}_0$  denota el conjunto de coordenadas del sistema estocástico al tiempo inicial  $t_0$  y  $P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0)$  da la probabilidad de que el sistema tenga coordenadas  $\mathbf{x}$  al tiempo final  $t$ . La forma explícita de la funcional  $F[\mathbf{x}(\tau)]$ ,  $t_0 \leq \tau \leq t$  y el valor y sentido físico de la constante  $D$  dependen de las propiedades del sistema.

En mecánica cuántica, el objeto de interés es la amplitud de transición  $K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0)$ , que no es una probabilidad, pero su expresión en términos de una integral de trayectoria es similar que para el caso de la teoría de procesos estocásticos. En el caso más general, la integral de trayectoria en

el espacio fase es

$$K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) \sim \sum_{\substack{\text{todas las trayectorias} \\ \text{en el espacio fase} \\ \text{con } \mathbf{x}_0 \text{ a } \mathbf{x} \text{ fijos}}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[\mathbf{x}(\tau), \mathbf{p}(\tau)] \right\}. \quad (2.2)$$

Aquí,  $S[\mathbf{x}(\tau), \mathbf{p}(\tau)]$  es la acción del sistema en términos de las variables del espacio fase. A diferencia del caso para procesos estocásticos, en mecánica cuántica el exponente tiene un argumento puramente imaginario.

En el caso de sistemas con un número infinito de grados de libertad, en particular, la función de Green en teoría cuántica de campo está dada por una expresión del tipo

$$\langle 0 | \hat{A}(\hat{\varphi}) | 0 \rangle \sim \sum_{\substack{\text{todas las} \\ \text{configuraciones} \\ \text{de campo}}} A(\varphi) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[\varphi] \right\}, \quad (2.3)$$

donde, del lado izquierdo,  $\hat{A}(\hat{\varphi})$  es un operador no local que actúa sobre los operadores de campo  $\hat{\varphi}$ , mientras que en el lado derecho  $A(\varphi)$  es su correspondiente cantidad clásica. Después de una transición puramente imaginaria en el tiempo  $t \rightarrow -it$  (correspondiendo a lo que se llama *Euclidean quantum field theory* [2.1]), la función de Green toma la siguiente forma

$$\langle 0 | \hat{A}(\hat{\varphi}) | 0 \rangle \sim \sum_{\substack{\text{todas las} \\ \text{configuraciones} \\ \text{de campo}}} A(\varphi) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} S[\varphi] \right\}, \quad (2.4)$$

mientras que en mecánica estadística, los valores promedio son calculados como

$$\langle A(\varphi) \rangle \sim \sum_{\substack{\text{todas las} \\ \text{configuraciones}}} A(\varphi) \exp \left\{ -\frac{1}{k_B T} E[\varphi] \right\}, \quad (2.5)$$

con  $k_B$  la constante de Boltzmann y  $T$  la temperatura [2.1].

Cronológicamente, la teoría cuántica de campos está íntimamente ligada con la teoría clásica de campo del electromagnetismo y con la física de partículas. Experimentalmente, ésta también se conecta con los experimentos de altas energías en los aceleradores. Los orígenes de la mecánica estadística son diferentes, históricamente, se relaciona con la termodinámica, irreversibilidad y la teoría cinética de los gases. Experimentalmente se

encuentra profundamente relacionada con la calorimetría, calor específico, parámetros de orden, transiciones de fase y difusión. Sin embargo, todas las expresiones en las Ecs. (2.1)-(2.5) tienen la misma forma funcional, por lo que pueden ser tratadas matemáticamente y calculadas de la misma manera, extendiendo los métodos desarrollados en física estadística a la teoría cuántica de campos y viceversa [2.1].

## 2.1. Integral de trayectoria para caminatas aleatorias simples

Para hacer el estudio de RW es conveniente empezar una discusión sobre el movimiento de un RW en una red regular, infinita, en un espacio euclidiano  $d$ -dimensional. Cada sitio en la red tiene  $q$  vecinos cercanos, este parámetro es conocido en la teoría de percolación como el número de coordinación de la red [2.2]. A intervalos regulares de tiempo (por conveniencia pensemos en que el incremento en el tiempo para dos instantes consecutivos es  $\Delta t = 1$ ), el RW salta de un sitio hacia alguno otro de sus vecinos. Consideremos un sistema sin dirección preferida, entonces la probabilidad de caer en algún sitio adyacente es  $1/q$  [2.3, 2.4]. Consideraremos que los saltos sucesivos son eventos estadísticamente independientes. Escogemos por red al hipercubo de dimensión  $d$  generado por la base canónica ortonormal  $\{\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_d\}$  de  $\mathbb{R}^d$ , por lo tanto, los sitios en la red son ubicados a través de la combinación lineal  $\mathbf{x} = x^\mu \mathbf{e}_\mu$ , donde las coordenadas  $x_\mu$  son números enteros. De esta forma, el espacio de estados del sistema es  $\mathbb{Z}^d$ . Para este tipo de redes, el número de coordinación es  $q = 2d$ . Nos interesa determinar la probabilidad de transición  $P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0)$  de que el RW esté en el sitio  $\mathbf{x}$  al tiempo  $t$  sabiendo que su posición inicial fue  $\mathbf{x}_0$  al tiempo  $t_0$ . Para  $t = t_0$  imponemos la condición  $P(\mathbf{x}, t_0; \mathbf{x}_0, t_0) = \delta_{\mathbf{x}, \mathbf{x}_0}$ , es decir, el RW no puede estar en dos lugares diferentes en el mismo instante de tiempo. Dado  $t$ , la condición de normalización es

$$\sum_{\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d} P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = 1, \quad (2.6)$$

lo cual significa que el RW con certeza estará en algún punto de la red.

La formulación discreta depende fuertemente de la elección de la red. Sin embargo, estamos interesados en aquellas propiedades asintóticas que son independientes de la estructura particular de la red elegida [2.3].

### 2.1.1. La probabilidad de transición

Entonces, si pensamos en la suma de todas las posibles trayectorias que nos llevan del sitio  $\mathbf{x}_0$  en el instante  $t_0$  al sitio  $\mathbf{x}$  en el instante  $t + 1$ . Una trayectoria de longitud  $t + 1$  se obtiene añadiendo un paso a una trayectoria de longitud  $t$ , es decir, para estar en  $\mathbf{x}$  al instante  $t + 1$ , el RW debió de haber estado en algún sitio vecino  $\mathbf{x}'$  al instante  $t$ , por lo tanto

$$P(\mathbf{x}, t + 1; \mathbf{x}_0, t_0) = \frac{1}{2d} \sum_{\mathbf{x}'} P(\mathbf{x}', t; \mathbf{x}_0, t_0), \quad (2.7)$$

la cual es una relación de recurrencia entre tiempos consecutivos. En términos de la base canónica, los sitios vecinos para  $\mathbf{x}$  son  $\mathbf{x}' = \mathbf{x} \pm \mathbf{e}_\mu$ . Usando la definición del operador laplaciano  $\Delta_r$  en su versión discreta [2.3]

$$\Delta_r f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2d} \sum_{\mu=1}^d [f(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\mu) + f(\mathbf{x} - \mathbf{e}_\mu) - 2f(\mathbf{x})] \quad (2.8)$$

siempre que  $|e_\mu| = 1$ , se encuentra que la probabilidad de transición satisface

$$P(\mathbf{x}, t + 1; \mathbf{x}_0, t_0) - P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = \Delta_r P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0), \quad (2.9)$$

ésta es una aproximación en diferencias finitas de la ecuación de difusión en el espacio continuo

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} - \Delta \right) P = 0. \quad (2.10)$$

Para resolver la ecuación en diferencias finitas en la Ec. (2.9), utilicemos la transformada de Fourier

$$P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)] \tilde{P}(\mathbf{k}, t). \quad (2.11)$$

Para que se satisfaga la condición inicial, debe ocurrir  $\tilde{P}(\mathbf{k}, t_0) = \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_0)$ . Ahora, la transformada de Fourier de la probabilidad de transición como una suma sobre trayectorias en la Ec. (2.7) es

$$\begin{aligned} \tilde{P}(\mathbf{k}, t + 1) &= \frac{1}{2d} \sum_{\mu=1}^d \left[ \tilde{P}(\mathbf{k} + \mathbf{e}_\mu, t) + \tilde{P}(\mathbf{k} - \mathbf{e}_\mu, t) \right] \\ &= \frac{1}{d} \tilde{P}(\mathbf{k}, t) \sum_{\mu=1}^d \cos k_\mu, \end{aligned} \quad (2.12)$$

cuya solución es

$$P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)] \left( \frac{1}{d} \sum_{\mu=1}^d \cos k_{\mu} \right)^{(t-t_0)}. \quad (2.13)$$

Si queremos obtener las propiedades asintóticas de esta solución a distancias y tiempo grandes comparadas con el espaciamiento de la red y el incremento temporal, es conveniente hacer un reescalamiento usando el espaciamiento de la red  $a$  y el intervalo de tiempo  $\tau$ , ahora  $\mathbf{e}_{\mu} \cdot \mathbf{e}_{\nu} = a^2 \delta_{\mu\nu}$ , y hacemos los cambios de variables  $t \rightarrow t/\tau$ ,  $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}/a$  y  $\mathbf{k} \rightarrow a\mathbf{k}$ , la solución anterior toma la siguiente forma

$$P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = a^d \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)] \left( \frac{1}{d} \sum_{\mu=1}^d \cos k_{\mu} \right)^{(t-t_0)/\tau}. \quad (2.14)$$

De manera rudimentaria podemos aproximar la densidad de probabilidad de  $P$  como  $\rho(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) \approx P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0)/a^d$ , donde  $a^d$  es el volumen elemental de la red. Tomemos el límite  $a \rightarrow 0$  y  $\tau \rightarrow 0$  manteniendo  $|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|$  y  $t - t_0$  fijos, así la densidad de probabilidad de  $P$  es

$$\rho(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = \lim_{a, \tau \rightarrow 0} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)] \left( \frac{1}{d} \sum_{\mu=1}^d \cos k_{\mu} \right)^{(t-t_0)/\tau}. \quad (2.15)$$

Este límite es no trivial solo cuando  $a$  y  $\tau$  tienden a cero de tal manera en que la razón  $\tau/a^2$  se mantiene fija. Si la escala de tiempo la fijamos como  $\tau = a^2/2d$ , entonces

$$\left( \frac{1}{d} \sum_{\mu=1}^d \cos k_{\mu} \right)^{(t-t_0)/\tau} = \left( 1 - \frac{a^2}{2d} k^2 + \dots \right)^{(t-t_0)/\tau} \rightarrow \exp[-(t-t_0)k^2], \quad (2.16)$$

por lo tanto, la densidad de probabilidad queda como

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \exp[-(t-t_0)k^2 + i(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{k}] \\ &= \frac{1}{[4\pi(t-t_0)]^{d/2}} \exp\left[-\frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^2}{4(t-t_0)}\right], \end{aligned} \quad (2.17)$$

siendo el kernel de la ecuación de difusión en el espacio continuo, ésta es positiva, simétrica y satisface las siguientes condiciones [2.3]:

1. Ley de conservación de la probabilidad

$$\int d^d x \rho(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = 1; \quad (2.18)$$

2. Descripción de condiciones iniciales

$$\lim_{t \rightarrow t_0} \rho(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0); \quad (2.19)$$

3. Ecuación de difusión

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} - \Delta \right) \rho(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = 0; \quad (2.20)$$

4. Proceso de Markov. Si  $t' > t > t_0$ , entonces  $\rho(\mathbf{x}', t'; \mathbf{x}, t)$  satisface la ecuación de Kolmogorov-Chapman:

$$\rho(\mathbf{x}', t'; \mathbf{x}_0, t_0) = \int d^d x \rho(\mathbf{x}', t'; \mathbf{x}, t) \rho(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0), \quad (2.21)$$

esta última característica es compatible con las propiedades de convolución de las integrales Gaussianas.

De la condición

$$\tau = \frac{a^2}{2d} \quad (2.22)$$

emerge la dimensión de Hausdorff  $\tau^{-1} \sim a^{-2}$  de las trayectorias brownianas típicas. Cuando la curva continúa a velocidad constante  $a/\tau$ , el comportamiento típico de la distancia media es  $|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0| \sim (t - t_0)^{1/2}$ , definiendo un exponente  $\nu$  característico de la distancia mediante la relación  $|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0| \sim (t - t_0)^\nu$ , el valor de  $\nu = 1/2$  es el típico para el Movimiento Browniano [2.1].

## 2.2. Función de Green y la acción para un RW

De la teoría de las cadenas de Markov para tiempo discreto, la función de Green  $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0)$  es el número esperado del total de sitios visitados antes de llegar a  $\mathbf{x}$  partiendo de  $\mathbf{x}_0$ . Existe el análogo de la función de Green para el caso del Movimiento Browniano, si la probabilidad de transición

por paso es  $P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0)$ , entonces se define la función de Green como sigue [2.5–2.9]:

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \int_{t_0}^{\infty} dt P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0), \quad (2.23)$$

en particular, si el proceso corresponde a un RWs con probabilidad de transición, entonces

$$P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = \frac{1}{[4D\pi(t-t_0)]^{d/2}} \exp \left[ -\frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^2}{4D(t-t_0)} \right]. \quad (2.24)$$

Si consideramos al RWs como un proceso de Markov, entonces podemos escribir la probabilidad de transición como una convolución debida a la ecuación de Kolmogorov-Chapman [2.1, 2.3]

$$P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = \int_{V'} d\mathbf{x}' P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') P(\mathbf{x}', t'; \mathbf{x}_0, t_0), \quad (2.25)$$

usando esta propiedad para  $n$  pasos intermedios, tenemos que

$$\begin{aligned} P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) &= \int \left( \prod_{j=1}^{n-1} d^d x_j \right) \left( \prod_{j=0}^{n-1} \frac{1}{[4D\pi(t_{j+1} - t_j)]^{d/2}} \right) \\ &\times \exp \left[ -\frac{1}{4D} \sum_{j=0}^{n-1} \frac{(\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j)^2}{t_{j+1} - t_j} \right], \end{aligned} \quad (2.26)$$

donde  $\mathbf{x}_n = \mathbf{x}$  y  $t_n = t$ . Para  $n \rightarrow \infty$ , la función de Green toma la forma de una integral de trayectoria

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \int_{t_0}^{\infty} dt \int \mathcal{D}\mathbf{x}(t) \exp \left[ -\int_{t_0}^t d\tau \frac{\dot{\mathbf{x}}^2(\tau)}{4D} \right], \quad (2.27)$$

de donde identificamos que la acción correspondiente es

$$S_0 = \int_{t_0}^t d\tau \frac{\dot{\mathbf{x}}^2(\tau)}{4D} = \int_{t_0}^t d\tau \mathcal{L}_0 \quad (2.28)$$

donde  $\mathcal{L}_0$  tiene la misma forma que la correspondiente lagrangiana para una partícula libre con masa equivalente  $m = 1/2D$ , de esta forma, la función de Green la escribimos como

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \int_{t_0}^{\infty} dt \int \mathcal{D}\mathbf{x}(t) \exp [-S_0]. \quad (2.29)$$

Con este resultado, a través de la integral de trayectoria, se establece una relación entre la probabilidad de transición de un RWs y el movimiento de una partícula libre en el contexto de la mecánica clásica [2.3]. Una vez que sabemos de esta conexión, surge de manera natural la siguiente pregunta: ¿Qué pasaría si en la expresión para la integral de trayectoria en la Ec. (2.29) se considera una lagrangiana que contenga un término de energía potencial? Una respuesta a esta pregunta la desarrollaremos en el siguiente capítulo. Para ello, consideraremos una perturbación de la lagrangiana para una partícula libre generada por un potencial  $V(x)$  con un acoplamiento  $|\varepsilon| \ll 1$ .

# Bibliografía

- [2.1] M. Chaichian and A. Demichev, *Path Integrals in Physics: Volume II Quantum Field Theory, Statistical Physics and other Modern Applications*. Institute of physics series in mathematical and computational physics, Taylor & Francis, 2001.
- [2.2] D. ben Avraham and S. Havlin, *Diffusion and Reactions in Fractals and Disordered Systems*. Cambridge University Press, 2000.
- [2.3] C. Itzykson and J. Drouffe, *Statistical Field Theory: Volume 1, From Brownian Motion to Renormalization and Lattice Gauge Theory*. Cambridge Monographs on Mathematical Physics, Cambridge University Press, 1991.
- [2.4] G. Parisi, *Statistical Field Theory*. Advanced book classics, Perseus Books, 1998.
- [2.5] T. Konstantopoulos, *Notas de curso: Green function, Seminar on Brownian motion*. Uppsala University, 2011.
- [2.6] P. Kim and A. Mimica, “Green function estimates for subordinate Brownian motions: stable and beyond,” *Transactions of the American Mathematical Society*, vol. 366, no. 8, pp. 4383–4422, 2014.
- [2.7] M. Sato and M. Katori, “Determinantal correlations of Brownian paths in the plane with nonintersection condition on their loop-erased parts,” *Physical Review E*, vol. 83, no. 4, p. 041127, 2011.
- [2.8] C. Garban, R. Rhodes, and V. Vargas, “Liouville Brownian Motion,” *arXiv preprint arXiv:1301.2876*, 2013.
- [2.9] H. Kleinert, “Fractional quantum field theory, path integral, and stochastic differential equation for strongly interacting many-particle systems,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 100, no. 1, p. 10001, 2012.



## Capítulo 3

# El RW en presencia de un campo externo débil

En este capítulo determinaremos la probabilidad de transición correspondiente a un proceso estocástico generado por la acción para una partícula libre con una perturbación generada por un potencial externo  $V(\mathbf{x})$ .

En la sección 2.2, encontramos que la función de Green puede expresarse a través de la Ec. (2.29) como una integral de trayectoria que involucra directamente a la acción  $S_0$  de una partícula libre. Ahora, consideremos un sistema conformado por un RW en un medio continuo sometido a la influencia de un campo externo con potencial  $V(\mathbf{x}, t)$ , de tal forma que la acción es

$$S = \int_0^t dt' [\mathcal{L}_0 - \varepsilon V(\mathbf{x}, t)], \quad (3.1)$$

donde

$$\mathcal{L}_0 = \frac{\dot{\mathbf{x}}(t')^2}{4D} \quad (3.2)$$

es la lagrangia para una partícula libre con masa  $m = 1/2D$ ,  $\varepsilon$  es la constante de acoplamiento del campo y la consideraremos de tal forma que  $|\varepsilon| \ll 1$ , es decir, la inclusión del campo en el comportamiento de un RW aparece como una perturbación. A continuación, introduciremos esta lagrangiana a la integral de trayectoria para obtener la probabilidad de transición de un proceso perturbado.

### 3.1. La función de Green y la integral de trayectoria

Consideremos una lagrangiana de una partícula libre con masa  $m = 1/2D$  sometida a una fuerza conservativa con potencial  $V(\mathbf{x}(t))$  con un acoplamiento perturbativo  $|\varepsilon| \ll 1$ , de esta forma, la lagrangiana es

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 - \varepsilon V(\mathbf{x}(t)) \quad (3.3)$$

mientras que la acción toma la siguiente forma

$$S = \int_{t_0}^t d\tau \mathcal{L} = S_0 - \varepsilon \int_{t_0}^t d\tau V(\mathbf{x}(\tau)). \quad (3.4)$$

Introduciendo esta acción en la expresión general para la función de Green como una integral de trayectoria, encontramos que

$$G_V(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \int_{t_0}^{\infty} dt \int \mathcal{D}\mathbf{x}(t) \exp \left[ -S_0 + \varepsilon \int_{t_0}^t d\tau V(\mathbf{x}(\tau)) \right], \quad (3.5)$$

en donde hemos usado el subíndice  $V$  para denotar la función de Green para la lagrangiana en la Ec. (3.3). Ahora, para  $n$  pasos intermedios que ocurren en los tiempos  $t_0 < t_1 < \dots < t_n = t$  mientras que  $\mathbf{x}(t_j) = \mathbf{x}_j$ , podemos aproximar la integral dentro de la exponencial en la Ec. (3.5) de la siguiente manera

$$\int_{t_0}^t d\tau V(\mathbf{x}(\tau)) \approx \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{n-1} \mathcal{V}(\mathbf{x}_{j+1}, t_{j+1}; \mathbf{x}_j, t_j), \quad (3.6)$$

donde

$$\mathcal{V}(\mathbf{x}_{j+1}, t_{j+1}; \mathbf{x}_j, t_j) = (t_{j+1} - t_j) [V(\mathbf{x}_{j+1}) + V(\mathbf{x}_j)] \quad (3.7)$$

que es el promedio de las sumas de Riemann por la derecha y la izquierda, esto se hace para garantizar que  $\mathcal{V}$  dependa del punto inicial y final [3.1]. De esta forma, la integral de trayectoria en la Ec. (3.5) es

$$\begin{aligned} & \int \mathcal{D}\mathbf{x}(t) \exp \left[ -S_0 + \varepsilon \int_{t_0}^t d\tau V(\mathbf{x}(t)) \right] \propto \int \left( \prod_{j=1}^{n-1} d\mathbf{x}_j \right) \\ & \times \exp \left\{ \sum_{j=0}^{n-1} \left[ -\frac{(\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j)^2}{4D(t_{j+1} - t_j)} + \frac{\varepsilon}{2} \mathcal{V}(\mathbf{x}_{j+1}, t_{j+1}; \mathbf{x}_j, t_j) \right] \right\}. \quad (3.8) \end{aligned}$$

Observemos que

$$\exp \left\{ \sum_{j=0}^{n-1} \left[ -\frac{(\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j)^2}{4D(t_{j+1} - t_j)} + \frac{\varepsilon}{2} \mathcal{V}(\mathbf{x}_{j+1}, t_{j+1}; \mathbf{x}_j, t_j) \right] \right\} = \prod_{j=0}^{n-1} \exp \left[ -\frac{(\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j)^2}{4D(t_{j+1} - t_j)} + \frac{\varepsilon}{2} \mathcal{V}(\mathbf{x}_{j+1}, t_{j+1}; \mathbf{x}_j, t_j) \right] \quad (3.9)$$

por lo tanto, la función de Green para el proceso generado por la acción de una partícula libre bajo la influencia de un campo externo conservativo es

$$G_V(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \propto \int_{t_0}^{\infty} dt \int \left( \prod_{j=1}^{n-1} d\mathbf{x}_j \right) \times \prod_{j=0}^{n-1} \exp \left[ -\frac{(\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j)^2}{4D(t_{j+1} - t_j)} + \frac{\varepsilon}{2} \mathcal{V}(\mathbf{x}_{j+1}, t_{j+1}; \mathbf{x}_j, t_j) \right], \quad (3.10)$$

identificamos la probabilidad de transición por paso  $P_V$  del proceso estocástico asociado con la lagrangiana de la Ec. (3.3) como

$$P_V(\mathbf{x}_{j+1}, t_{j+1}; \mathbf{x}_j, t_j) \propto \exp \left[ -\frac{(\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j)^2}{4D(t_{j+1} - t_j)} + \frac{\varepsilon}{2} \mathcal{V}(\mathbf{x}_{j+1}, t_{j+1}; \mathbf{x}_j, t_j) \right], \quad (3.11)$$

de esta forma

$$G_V(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \propto \int_{t_0}^{\infty} dt \int \left( \prod_{j=1}^{n-1} d\mathbf{x}_j \right) \left( \prod_{j=0}^{n-1} P_V(\mathbf{x}_{j+1}, t_{j+1}; \mathbf{x}_j, t_j) \right) \quad (3.12)$$

$$G_V(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \int_{t_0}^{\infty} dt \mathcal{N} P_V(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0). \quad (3.13)$$

El proceso estocástico generado por la lagrangiana en la Ec. (3.3) es un proceso de Markov y satisface la ecuación de Kolmogorov-Chapman siempre que la integral de trayectoria en la Ec. (3.5) tienda a cero cuando  $x \rightarrow \infty$  [3.2, 3.3]. Aquí la constante de proporcionalidad  $\mathcal{N}$  depende de la condición de normalización en  $\mathcal{D}\mathbf{x}$ , la cual será calculada a primer orden en la siguiente sección. Adicionalmente,  $P_V$  satisface una ecuación del tipo Schrödinger

$$\frac{\partial P_V}{\partial t} = D\Delta P_V - \varepsilon V(\mathbf{x})P_V, \quad (3.14)$$

con la condición inicial  $P_V(\mathbf{x}, t_0; \mathbf{x}_0, t_0) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$  [3.2, 3.3]. Esto significa que la partícula browniana no puede ser observado en dos sitios diferentes simultáneamente [3.4].

## 3.2. Condición de normalización para $P_V$

Hemos encontrado que la probabilidad de transición por paso está dada a través de la Ec. (3.11), pero es necesario normalizarla, para ello, fijémonos en la expansión en serie de Taylor siguiente

$$\exp\left[\frac{\varepsilon}{2}\mathcal{V}\right] = 1 + \frac{\varepsilon}{2}\mathcal{V} + \frac{1}{2!}\left(\frac{\varepsilon}{2}\right)^2\mathcal{V}^2 + \dots \quad (3.15)$$

Con esto, la condición de normalización queda como

$$1 = \mathcal{N}\{I_0 + I_1 + I_2 + \dots\} \quad (3.16)$$

donde  $I_k$  está dada por

$$I_k = \frac{1}{k!}\left(\frac{\varepsilon}{2}\right)^k \int_{V_\infty} d\mathbf{x} \exp\left[-\frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^2}{4D(t - t_0)}\right] \mathcal{V}^k(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0), \quad (3.17)$$

donde  $\int_{V_\infty} d\mathbf{x} = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dx_d$ . En particular,  $I_0 = [4D\pi(t - t_0)]^{d/2}$ , que corresponde a la constante de normalización para un proceso de RW libre en  $d$  dimensiones [3.4]. Ahora

$$I_1 = \frac{\varepsilon(t - t_0)}{2} \left\{ V(\mathbf{x}_0)[4D\pi(t - t_0)]^{d/2} + \int_{V_\infty} d\mathbf{x} \exp\left[-\frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^2}{4D(t - t_0)}\right] V(\mathbf{x}) \right\}, \quad (3.18)$$

asumiendo que la serie de Taylor para  $V(\mathbf{x})$  alrededor de  $\mathbf{x}_0$  existe, entonces

$$\int_{V_\infty} d\mathbf{x} \exp\left[-\frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^2}{4D(t - t_0)}\right] V(\mathbf{x}) = [4D\pi(t - t_0)]^{d/2} \times \sum_{n_1=0}^{\infty} \dots \sum_{n_d=0}^{\infty} \frac{v_{2n_1 \dots 2n_d} [2D(t - t_0)]^{(n_1 + \dots + n_d)}}{2^{n_1 + \dots + n_d} n_1! \dots n_d!}, \quad (3.19)$$

en donde los coeficientes son calculados a través de la siguiente expresión

$$v_{2n_1 \dots 2n_d} = \frac{\partial^{2n_1}}{\partial x_1^{2n_1}} \dots \frac{\partial^{2n_d}}{\partial x_d^{2n_d}} V(\mathbf{x}) \Big|_{\mathbf{x}_0}. \quad (3.20)$$

Usando  $I_0$  y  $I_1$ , la constante de normalización a primer orden en la serie perturbativa queda como

$$\mathcal{N}^{-1} = [4D\pi(t-t_0)]^{d/2} \left\{ 1 + \frac{\varepsilon(t-t_0)}{2} V(\mathbf{x}_0) + \frac{\varepsilon(t-t_0)}{2} \Gamma \right\} \quad (3.21a)$$

$$= [4D\pi(t-t_0)]^{d/2} \mathcal{N}'^{-1}, \quad (3.21b)$$

donde denotamos por  $\Gamma$  a todas las sumas en la Ec. (3.19). En la Ec. (3.21b),  $\mathcal{N}^{-1}$  ha sido factorizada de una manera conveniente, de esta forma, el primer factor puede ser usado para completar la expresión de la probabilidad de transición para un RW en la Ec. (3.11). El factor restante ( $\mathcal{N}'^{-1}$ ), la suma entre corchetes en la Ec. (3.21a), incluye información acerca del potencial externo y su rol fundamental es el de ser la constante de normalización para  $P_V$  [3.1].

De esta forma, encontramos que la probabilidad de transición a primer orden en la serie perturbativa es

$$P_V(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = \mathcal{N}' P \left[ 1 + \frac{\varepsilon}{2} \mathcal{V}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) \right] \quad (3.22a)$$

$$\begin{aligned} &= P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) - \frac{\varepsilon(t-t_0)}{2} \Gamma \mathcal{N}' P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0); \\ &\quad + \frac{\varepsilon(t-t_0)}{2} \mathcal{N}' V(\mathbf{x}) P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0), \end{aligned} \quad (3.22b)$$

donde  $P$  denota la probabilidad de transición para un RWs. Esta última expresión ya se encuentra normalizada y ha sido escrita de manera conveniente para que tenga la forma de una serie perturbativa, donde el término de orden cero corresponde a la parte libre (la probabilidad de transición de un RWs), mientras que el término a primer orden en  $\varepsilon$  corresponde a la perturbación generada por la lagrangiana en la Ec. (3.3) [3.1]. Esta aproximación es válida siempre que el término a segundo orden en la serie de Taylor para  $\exp[\varepsilon\mathcal{V}/2]$  sea más pequeño que el término a primer orden, esto es  $\frac{\varepsilon}{2}\mathcal{V} > \frac{\varepsilon^2}{8}\mathcal{V}^2$ , lo que nos conduce a la condición  $\mathcal{V} < 4/\varepsilon$ .

### 3.3. Función generadora de momentos

Sabemos que la función generadora de momentos nos permite calcular los valores esperados de una distribución a partir de sus derivadas, de aquí la importancia de determinarla.

Ahora, calculemos la función generadora de momentos para  $P_V$  a través de

$$M_{\mathbf{x},P_V}(\mathbf{T}) = \int_{V_\infty} d\mathbf{x} \exp(\mathbf{x} \cdot \mathbf{T}) P_V, \quad (3.23)$$

con  $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^d$ . Usando la aproximación a primer orden para  $P_V$  dada por la Ec. (3.22b), la función generadora de momentos queda como:

$$\begin{aligned} M_{\mathbf{x},P_V}(\mathbf{T}) &= M_{\mathbf{x},P}(\mathbf{T}) - \frac{\varepsilon(t-t_0)}{2} \Gamma \mathcal{N}' M_{\mathbf{x},P}(\mathbf{T}) \\ &+ \frac{\varepsilon(t-t_0)}{2} \mathcal{N}' \int_{V_\infty} d\mathbf{x} \exp(\mathbf{x} \cdot \mathbf{T}) V(\mathbf{x}) P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0), \end{aligned} \quad (3.24)$$

donde  $M_{\mathbf{x},P}(\mathbf{T})$  es la función generadora de momentos para la probabilidad de transición dada para una distribución normal como en la Ec. (2.24). Notemos que la integral restante tiene la misma forma que la integral en la Ec. (3.19), de tal forma que si ahora la serie de Taylor para  $V(\mathbf{x})$  existe alrededor de  $\mathbf{x}_0 + 2D(t-t_0)\mathbf{T}$ , de esta forma, la función generadora de momentos queda como

$$\begin{aligned} M_{\mathbf{x},P_V}(\mathbf{T}) &= M_{\mathbf{x},P}(\mathbf{T}) - \frac{\varepsilon(t-t_0)}{2} \Gamma \mathcal{N}' M_{\mathbf{x},P}(\mathbf{T}) \\ &+ \frac{\varepsilon(t-t_0)}{2} \mathcal{N}' \mathcal{N}'' \exp[\mathbf{T} \cdot [D(t-t_0)\mathbf{T} + \mathbf{x}_0]], \end{aligned} \quad (3.25)$$

donde

$$\mathcal{N}'' = \sum_{n_1=0}^{\infty} \dots \sum_{n_d=0}^{\infty} \frac{v'_{2n_1 \dots 2n_d}}{2^{n_1 + \dots + n_d}} \frac{[2D(t-t_0)]^{(n_1 + \dots + n_d)}}{n_1! \dots n_d!}, \quad (3.26)$$

y las constantes  $v'_{2n_1 \dots 2n_d}$  están dadas a través de

$$v'_{2n_1 \dots 2n_d} = \frac{\partial^{2n_1}}{\partial x_1^{2n_1}} \dots \frac{\partial^{2n_d}}{\partial x_d^{2n_d}} V(\mathbf{x}) \Big|_{\mathbf{x}_0 + 2D(t-t_0)\mathbf{T}}. \quad (3.27)$$

De esta forma la función generadora de momentos queda expresada mediante una serie perturbativa, en donde la parte libre corresponde a la función de generadora de la distribución normal [3.1].

### 3.4. Aplicaciones

En esta sección obtendremos la probabilidad de transición y los primeros dos momentos para el potencial lineal, el potencial tipo oscilador

armónico, el potencial de cuarto orden, el potencial tipo decaimiento exponencial y un potencial senusoidal a partir de la Ec. (3.22b), y los momentos como las derivadas de la función generadora dada en la Ec. (3.25). Además calcularemos el desplazamiento cuadrático medio del proceso perturbado usando  $\langle [\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}_0]^2 \rangle$ , donde  $\langle \mathbf{x}^2(t) \rangle$  y  $\langle \mathbf{x}(t) \rangle$  son calculados a través del primer y segundo momento de  $P_V$  [3.5, 3.6], solo los términos a primer orden en  $\varepsilon$  serán considerados. El desplazamiento cuadrático medio de las distribuciones  $P$  y  $P_V$  serán denotadas por  $MSD_P$ ,  $MSD_{P_V}$ , respectivamente.

### 3.4.1. Ejemplo 1: Potencial $V(x) = \kappa x$

Uno de los problemas más sencillos en la mecánica clásica es el estudio de una partícula sometido a un potencial lineal, el cual corresponde a la modelación del movimiento de una partícula sometida a una fuerza constante.

Para simplificar el problema, consideremos el sistema con dimensión  $d = 1$ , con esta consideración, si nuestro punto inicial es  $x_0$  al tiempo  $t_0$ , entonces  $V(x_0) = \kappa x_0$ , mientras que las cantidades necesarias para determinar la probabilidad de transición quedan como

$$\mathcal{V}(x, t; x_0, t_0) = \kappa(x + x_0)(t - t_0); \quad (3.28a)$$

$$\mathcal{N}'^{-1} = 1 + \varepsilon\kappa(t - t_0)x_0; \quad (3.28b)$$

$$\Gamma = \kappa x_0. \quad (3.28c)$$

Con esta información obtenemos la probabilidad de transición, de acuerdo con la Ec. (3.22b),  $P_V$  es

$$P_V(x, t; x_0, t_0) = P(x, t; x_0, t_0) + \frac{\varepsilon\kappa(x - x_0)(t - t_0)}{2 + 2\varepsilon\kappa x_0(t - t_0)} P(x, t; x_0, t_0). \quad (3.29)$$

La figura 3.1 muestra una comparación entre  $P$  (línea roja) y  $P_V$  (línea azul). Además, la función generadora de momentos es

$$\begin{aligned} M_{x, P_V}(T) &= M_{x, P}(T) - \frac{\varepsilon\kappa x_0(t - t_0)}{2 + 2\varepsilon\kappa x_0(t - t_0)} M_{x, P}(T) \\ &+ \frac{\kappa\varepsilon(t - t_0)}{2 + 2\varepsilon\kappa x_0(t - t_0)} [x_0 + 2D(t - t_0)T] \exp [D(t - t_0)T^2 + x_0T]. \end{aligned} \quad (3.30)$$

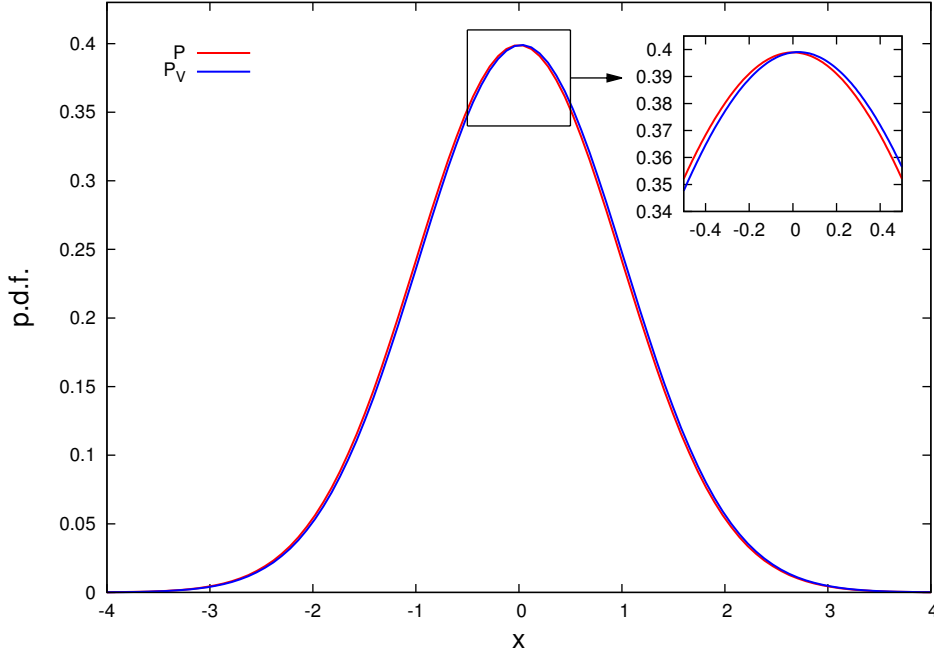


Figura 3.1: Comparación entre  $P$  y  $P_V$  para un RW bajo una perturbación de un potencial lineal. La línea roja y azul son la probabilidad de transición para  $P$  y  $P_V$  respectivamente. Para obtener explícitamente  $P_V$  se tomaron de forma arbitraria los siguientes valores:  $x_0 = 0$ ,  $\kappa = 1$ ,  $\varepsilon = 0.1$ ,  $D = 1$  y  $2Dt = 1$ .

### Primer momento

El primer momento de la probabilidad de transición  $P_V$  se calcula a través de la primera derivada de  $M_{x,P_V}$  [3.7], así

$$E_{P_V}(X) = \frac{d}{dT} M_{x,P_V}(T) \Big|_{T=0}, \quad (3.31)$$

por la propiedad de linealidad de la esperanza, entonces la diferencia entre el primer momento de  $P_V$  y la distribución normal puede escribirse en términos de la perturbación

$$\begin{aligned} E_{P_V}(X) - E_P(X) &= -\frac{\varepsilon\kappa x_0(t-t_0)}{2 + 2\varepsilon\kappa x_0(t-t_0)} E_P(X) + \frac{\kappa\varepsilon(t-t_0)}{2 + 2\varepsilon\kappa x_0(t-t_0)} \\ &\times \frac{d}{dT} \{ [x_0 + 2D(t-t_0)T] \exp [D(t-t_0)T^2 + x_0T] \} \Big|_{T=0}. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Usando esta aproximación, la desviación del primer momento generada por la perturbación de un potencial lineal es la siguiente

$$E_{P_V}(X) - E_P(X) = \frac{\varepsilon\kappa D(t - t_0)^2}{1 + \varepsilon\kappa x_0(t - t_0)}. \quad (3.33)$$

En el límite  $t \rightarrow t_0$ , el comportamiento a tiempos cortos de la diferencia del primer momento es

$$E_{P_V}(X) - E_P(X) \sim \varepsilon\kappa D(t - t_0)^2. \quad (3.34)$$

Mientras que en el límite  $t \rightarrow \infty$ , el comportamiento a tiempos largos queda como

$$E_{P_V}(X) - E_P(X) \sim \frac{Dt}{x_0}. \quad (3.35)$$

La figura 3.2 muestra el comportamiento asintótico de  $E_{P_V}(X) - E_P(X)$ . La figura 3.3 muestra el comportamiento asintótico de  $E_{P_V}(X) - E_P(X)$  para diferentes valores de la posición inicial  $x_0$ .

## Segundo momento

El segundo momento de  $P_V$  se calcula a través de la segunda derivada de  $M_{x,P_V}$  [3.7], así

$$E_{P_V}(X^2) = \frac{d^2}{dT^2} M_{x,P_V}(T) \Big|_{T=0}. \quad (3.36)$$

De igual manera que el primer momento, la diferencia entre el segundo momento de  $P_V$  y la distribución normal en términos de la perturbación es

$$\begin{aligned} E_{P_V}(X^2) - E_P(X^2) &= -\frac{\varepsilon\kappa x_0(t - t_0)}{2 + 2\varepsilon\kappa x_0(t - t_0)} E_P(X^2) + \frac{\kappa\varepsilon(t - t_0)}{2 + 2\varepsilon\kappa x_0(t - t_0)} \\ &\times \frac{d^2}{dT^2} \left\{ [x_0 + 2D(t - t_0)T] \exp [D(t - t_0)T^2 + x_0T] \right\} \Big|_{T=0}, \end{aligned} \quad (3.37)$$

donde  $E_P(X^2) = x_0^2 + 2D(t - t_0)$ . De esta forma, la diferencia de los segundos momentos para el potencial lineal es

$$E_{P_V}(X^2) - E_P(X^2) = \frac{2\varepsilon\kappa x_0 D(t - t_0)^2}{1 + \varepsilon\kappa x_0(t - t_0)}. \quad (3.38)$$

Finalmente, la desviación del desplazamiento cuadrático medio de  $P_V$  respecto de  $P$  es

$$MSD_{P_V} - MSD_P = 0. \quad (3.39)$$

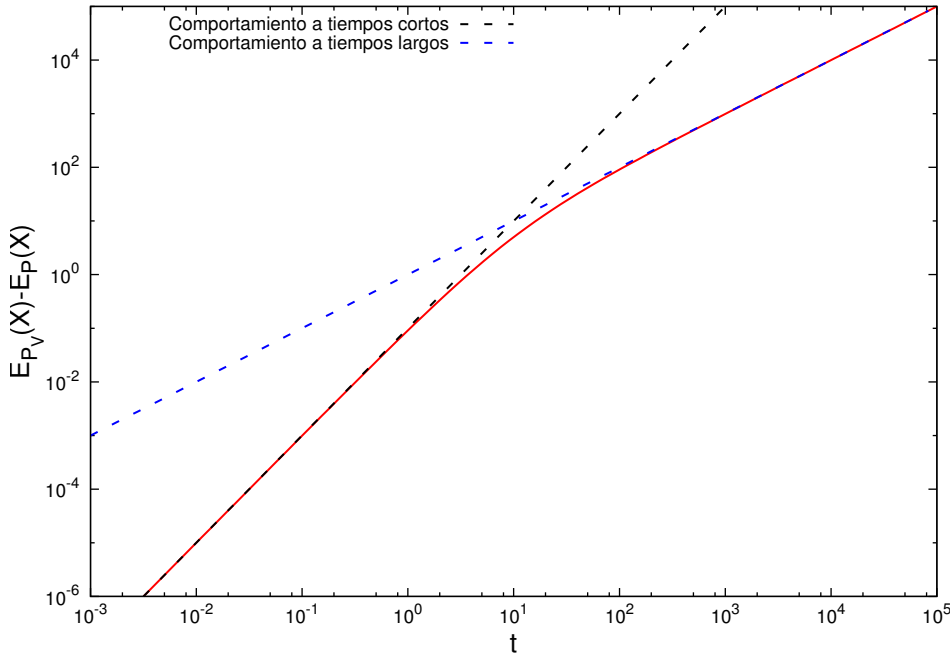


Figura 3.2: Comportamiento asintótico de  $E_{P_V}(X) - E_P(X)$  para un proceso perturbado por un potencial lineal. La línea roja representa a  $E_{P_V}(X) - E_P(X)$ . La línea punteada azul representa el comportamiento asintótico a tiempos largos, mientras que la línea punteada negra es el comportamiento asintótico a tiempos cortos. Para hacer la gráfica de  $P_V$  se tomaron los siguientes valores:  $x_0 = 1$ ,  $\kappa = 1$ ,  $\varepsilon = 0.1$  y  $D = 1$ .

### Observaciones

Debido a la perturbación generada por un potencial lineal, obtenemos un proceso estocástico que puede ser interpretado como el comportamiento de una partícula browniana sujeta a una fuerza constante, ya que  $E_{P_V}(X) - E_P(X) > 0$  para cualquier posición inicial  $x_0$  [3.1]. En particular, si  $x_0 = 0$ , tenemos las siguientes simplificaciones:

1. La posición promedio está dada por  $E_{P_V}(X) = \kappa\varepsilon D(t - t_0)^2$ ;
2. Las diferencias entre el segundo momento y el desplazamiento cuadrático medio de  $P_V$  respecto de  $P$  son cero.

Para este caso,  $P_V$  preserva todas las características de una distribución normal centrada en  $\kappa\varepsilon D(t - t_0)^2$ . De acuerdo con las ecuaciones clásicas para el movimiento de una partícula sujeta a una fuerza constante,  $2\kappa\varepsilon D$  puede ser interpretado como la aceleración con la cual la posición promedio del proceso perturbado se desvía de la posición promedio para un RW [3.1].

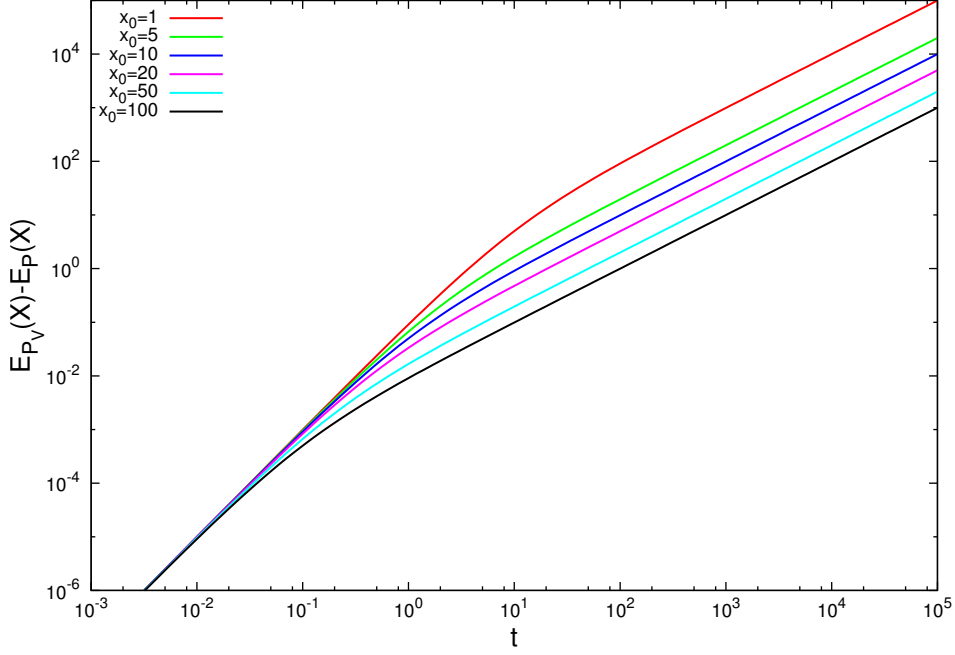


Figura 3.3: Comportamiento asintótico de  $E_{P_V}(X) - E_P(X)$  para un proceso perturbado por un potencial lineal con diferentes posiciones iniciales. Para construir  $P_V$  se consideraron los siguientes parámetros:  $\kappa = 1$ ,  $\varepsilon = 0.1$  y  $D = 1$ .

La figura 3.1 muestra un ligero corrimiento de  $P_V$  (línea azul) respecto de  $P$  (línea roja), mientras que la figura 3.4 muestra el corrimiento del valor máximo de  $P_V$ , el cual corresponde con  $E_{P_V}$ .

### 3.4.2. Ejemplo 2: Potencial $V(x) = \kappa x^2$

Otro potencial de interés en los modelos de la física es el cuadrático, en mecánica clásica esta forma del potencial modela las oscilaciones de un péndulo simple, de manera general, el potencial de la forma  $V(\mathbf{x}) = \kappa \mathbf{x}^2$  es conocido como el oscilador armónico. De manera semejante al ejemplo anterior, consideraremos el caso unidimensional y que la posición de la partícula es  $x_0$  al tiempo  $t_0$ , de esta forma, las cantidades necesarias para determinar la probabilidad de transición son:

$$\mathcal{V}(x, t; x_0, t_0) = \kappa(x^2 + x_0^2)(t - t_0); \quad (3.40a)$$

$$\mathcal{N}'^{-1} = 1 + \varepsilon\kappa(t - t_0)x_0^2 + \varepsilon\kappa D(t - t_0)^2; \quad (3.40b)$$

$$\Gamma = \kappa x_0^2 + 2\kappa D(t - t_0). \quad (3.40c)$$

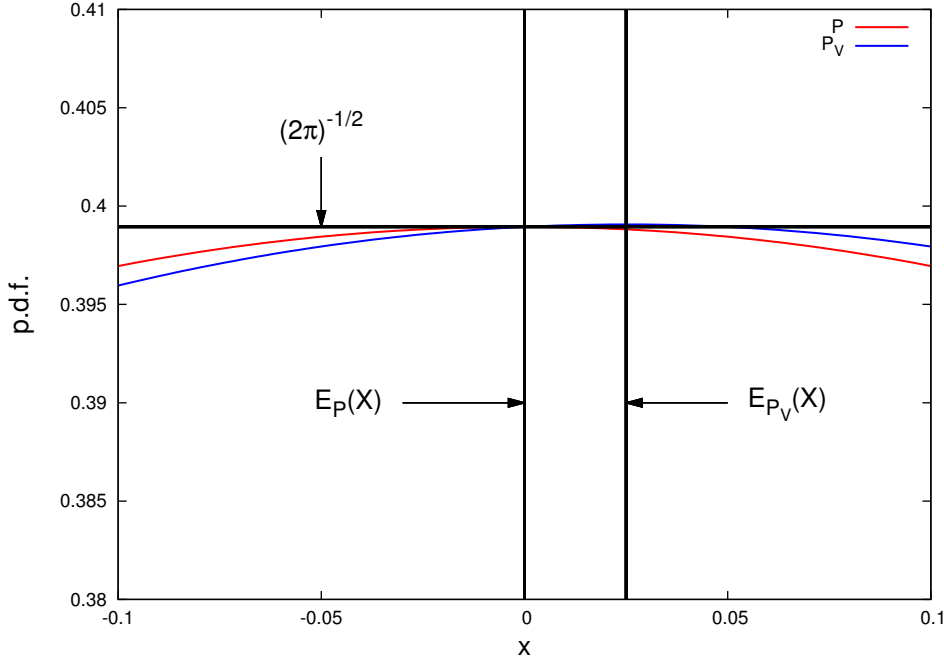


Figura 3.4: Maximos de  $P$  y  $P_V$  para un RW bajo una perturbaci3n de un potencial lineal. La lnea roja y azul son la probabilidad de transici3n para  $P$  y  $P_V$  respectivamente. Para construir  $P_V$  se consideraron los mismos parmetros que en la figura 3.1. Las lneas verticales muestran los valores del primer momento para  $P$  y  $P_V$ , que toman los siguientes valores  $E_P(X) = 0$  y  $E_{P_V} = 0.025$ , respectivamente. La lnea horizontal muestra el valor de distribuci3n normal estandar evaluada en  $x = 0$ .

de esta forma, la probabilidad de transici3n queda como

$$P_V(x, t; x_0, t_0) = P(x, t; x_0, t_0) - \varepsilon\kappa D(t - t_0)^2 \mathcal{N}' P(x, t; x_0, t_0) + \frac{\varepsilon\kappa(x^2 - x_0^2)(t - t_0)}{2} \mathcal{N}' P(x, t; x_0, t_0). \quad (3.41)$$

La figura 3.5 muestra la comparaci3n entre  $P$  (lnea azul) y  $P_V$  (lnea roja) para el potencial del tipo oscilador arm3nico. Y la funci3n generadora de momentos queda como:

$$M_{x,P_V}(T) = M_{x,P}(T) - \frac{\varepsilon\kappa(t - t_0)}{2} [x_0^2 + 2D(t - t_0)] \mathcal{N}' M_{x,P}(T) + \frac{\varepsilon}{2} \kappa(t - t_0) \mathcal{N}' [(x_0 + 2D(t - t_0)T)^2 + 2D(t - t_0)] \times \exp [D(t - t_0)T^2 + x_0T]. \quad (3.42)$$

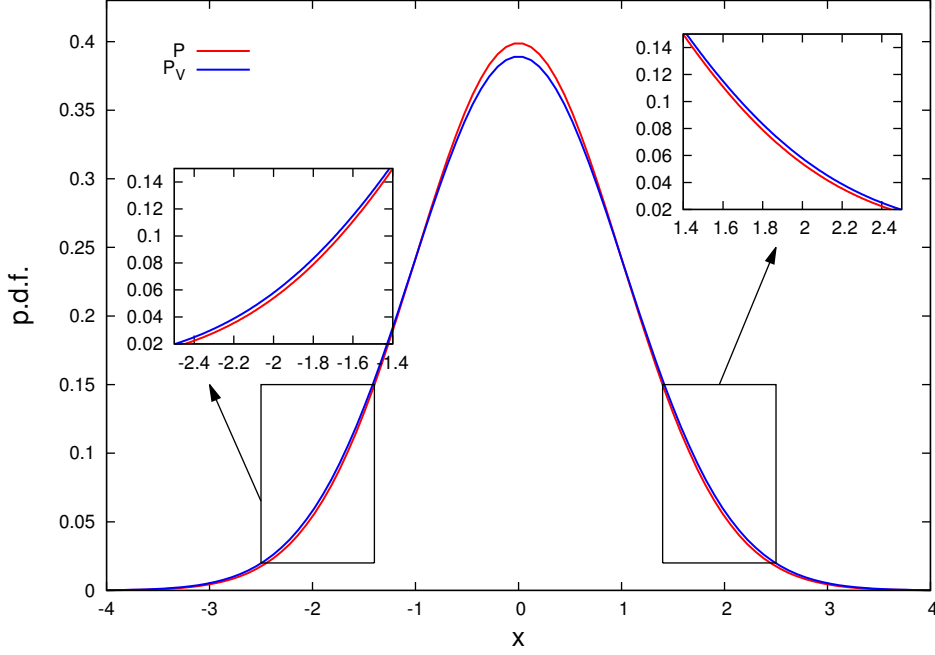


Figura 3.5: Comparación entre  $P$  y  $P_V$  para un RW bajo una perturbación de un potencial tipo oscilador armónico. La línea roja y azul son la probabilidad de transición para  $P$  y  $P_V$  respectivamente. Para construir  $P_V$  se consideraron los siguientes parámetros:  $x_0 = 0$ ,  $\kappa = 1$ ,  $\varepsilon = 0.1$ ,  $D = 1$  y  $2Dt = 1$ .

### Primer momento

Si calculamos la diferencia de momentos a partir de la Ec. (3.31), se encuentra que el primer momento comparado con el proceso libre para el potencial cuadrático es

$$E_{P_V}(X) - E_P(X) = \frac{2\varepsilon\kappa x_0 D(t - t_0)^2}{1 + \varepsilon\kappa(t - t_0)x_0^2 + \varepsilon\kappa D(t - t_0)^2}. \quad (3.43)$$

### Segundo momento

La diferencia de los segundos momentos es calculado a través de la Ec. (3.36), dando la siguiente aproximación:

$$E_{P_V}(X^2) - E_P(X^2) = \frac{4\varepsilon\kappa D(t - t_0)^2 [D(t - t_0) + x_0^2]}{1 + \varepsilon\kappa(t - t_0)x_0^2 + \varepsilon\kappa D(t - t_0)^2}. \quad (3.44)$$

De esta forma encontramos que la desviación del desplazamiento cuadrático medio de  $P_V$  respecto de  $P$  es

$$MSD_{P_V} - MSD_P = \frac{4\varepsilon\kappa D^2(t - t_0)^3}{1 + \varepsilon\kappa(t - t_0)x_0^2 + \varepsilon\kappa D(t - t_0)^2}. \quad (3.45)$$

### Observaciones

Si consideremos, por simplicidad, que  $x_0 = 0$ , entonces tenemos las siguientes simplificaciones

1. La posición promedio es  $E_{P_V}(X) = 0$ ;
2. El segundo momento y el desplazamiento cuadrático medio son

$$\frac{4\varepsilon\kappa D^2(t - t_0)^3}{1 + \varepsilon\kappa D(t - t_0)^2}. \quad (3.46)$$

En el límite  $(t - t_0) \rightarrow 0$ , la expansión binomial de la constante de normalización a primer orden en  $\varepsilon$  toma la siguiente forma  $\mathcal{N}' \approx 1 - 4\varepsilon\kappa D(t - t_0)^2$ , así, el comportamiento a tiempos cortos de la diferencia del desplazamiento cuadrático medio es  $MSD_{P_V} - MSD_P \sim 4\varepsilon\kappa D^2(t - t_0)^3$ . La figura 3.5 muestra el aumento en la amplitud de la probabilidad de transición para tiempos cortos. Además, en el límite  $t \rightarrow \infty$ , el comportamiento para tiempos largos de la diferencia del desplazamiento cuadrático medio es  $MSD_{P_V} - MSD_P \sim 4Dt$ . Observamos que el segundo momento y la diferencia del desplazamiento cuadrático medio incrementa en el tiempo como  $t$ , es decir, el proceso perturbado se propaga como un RWs [3.1].

### 3.4.3. Ejemplo 3: Potencial $V(x) = \kappa x^4$

Conviene estudiar este potencial en esta parte del trabajo ya que en el próximo capítulo lo usaremos para construir un potencial biestable, por lo que es útil tener su descripción completa en términos del formalismo desarrollado en este trabajo. Nuevamente y por simplicidad, consideremos únicamente el caso unidimensional del potencial  $V(x) = \kappa x^4$ , de esta forma, las cantidades necesarias para obtener la probabilidad de transición del

proceso perturbado son

$$\mathcal{V}(x, t; x_0, t_0) = \kappa(x^4 + x_0^4)(t - t_0); \quad (3.47a)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{N}'^{-1} &= 1 + \varepsilon\kappa(t - t_0)x_0^4 \\ &\quad + 6\varepsilon\kappa D(t - t_0)^2 [x_0^2 + D(t - t_0)]; \end{aligned} \quad (3.47b)$$

$$\Gamma = \kappa x_0^4 + 12\kappa D(t - t_0)[x_0^2 + D(t - t_0)]. \quad (3.47c)$$

Con esto, la probabilidad de transición es

$$\begin{aligned} P_V(x, t; x_0, t_0) &= P(x, t; t_0, t_0) \\ &\quad - 6\varepsilon\kappa D(t - t_0)^2 [x_0^2 + D(t - t_0)] \mathcal{N}' P(x, t; t_0, t_0) \\ &\quad + \frac{\varepsilon\kappa(t - t_0)}{2} (x^4 - x_0^4) \mathcal{N}' P(x, t; t_0, t_0). \end{aligned} \quad (3.48)$$

La figura 3.6 muestra una comparación entre  $P$  (línea roja) y  $P_V$  (línea azul) para este ejemplo. Y la función generadora de momentos es

$$\begin{aligned} M_{x, P_V} &= M_{x, P}(T) - \frac{\varepsilon\kappa(t - t_0)}{2} x_0^4 \mathcal{N}' M_{x, P}(T) \\ &\quad - 6\varepsilon\kappa D(t - t_0)^2 [x_0^2 + D(t - t_0)] \mathcal{N}' M_{x, P}(T) \\ &\quad + \frac{\varepsilon\kappa(t - t_0)}{2} \mathcal{N}' \mathcal{N}'' \exp[\mathbf{T} \cdot [D(t - t_0)\mathbf{T} + \mathbf{x}_0]], \end{aligned} \quad (3.49)$$

donde

$$\begin{aligned} \mathcal{N}'' &= [x_0 + 2D(t - t_0)T]^4 + 12D(t - t_0)[x_0 + 2D(t - t_0)T]^2 \\ &\quad + 12D^2(t - t_0)^2. \end{aligned} \quad (3.50)$$

### Primer momento

Ahora, el primer momento calculado a través de la Ec. (3.31) es

$$E_{P_V}(X) - E_P(X) = 24\varepsilon\kappa x_0 D^2(t - t_0)^3 \mathcal{N}' + 4\varepsilon\kappa x_0^3 D(t - t_0)^2 \mathcal{N}'. \quad (3.51)$$

### Segundo momento

El segundo momento calculado a través de la Ec. (3.36) es

$$\begin{aligned} E_{P_V}(X^2) - E_P(X^2) &= 48\varepsilon\kappa D^3(t - t_0)^4 \mathcal{N}' + 72\varepsilon\kappa x_0^2 D^2(t - t_0)^3 \mathcal{N}' \\ &\quad + 8\varepsilon\kappa x_0^4 D(t - t_0)^2 \mathcal{N}'. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Finalmente, la diferencia del desplazamiento cuadrático medio queda como

$$MSD_{P_V} - MSD_P = 48\varepsilon\kappa D^3(t - t_0)^4 \mathcal{N}' + 24\varepsilon\kappa x_0^2 D^2(t - t_0)^3 \mathcal{N}'. \quad (3.53)$$

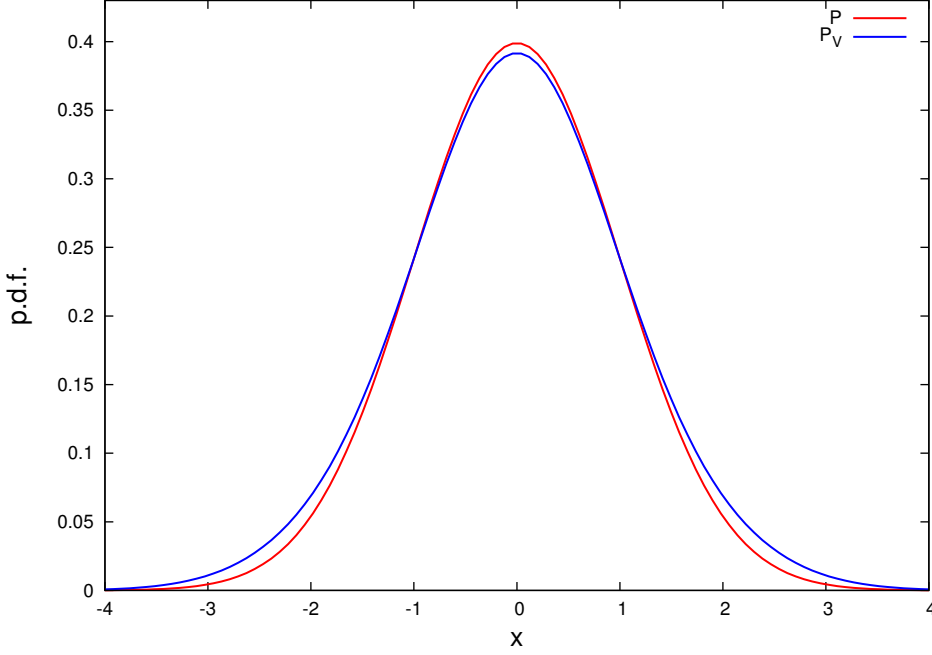


Figura 3.6: Comparación entre  $P$  y  $P_V$  para un RW bajo una perturbación de un potencial de cuarto orden en la posición. La línea roja y azul son la probabilidad de transición para  $P$  y  $P_V$  respectivamente. Para construir  $P_V$  se consideraron los siguientes parámetros:  $x_0 = 0$ ,  $\kappa = 1$ ,  $\varepsilon = 0.025$ ,  $D = 1$  y  $2Dt = 1$ .

### Observaciones

Para simplificar los cálculos, consideremos que la posición inicial de la partícula browniana es  $x_0 = 0$ , de esta forma tenemos las siguientes simplificaciones:

1. La posición promedio es cero.
2. La diferencia del desplazamiento cuadrático medio es

$$MSD_{P_V} - MSD_P = \frac{48\varepsilon\kappa D^3(t - t_0)^4}{1 + 6\varepsilon\kappa D^2(t - t_0)^3}. \quad (3.54)$$

En el límite  $t \rightarrow t_0$ , el comportamiento a tiempos cortos de la diferencia del desplazamiento cuadrático medio de  $P_V$  respecto a  $P$  es  $MSD_{P_V} - MSD_P \sim 48\varepsilon\kappa D^3(t - t_0)^4$ , siendo éste un proceso estocástico que se propaga más rápido que un RWs, incluso, más rápido que el proceso generado por la perturbación de un potencial tipo oscilador armónico como el que

mostramos en el ejemplo anterior. Por otro lado, en el límite  $t \rightarrow \infty$ , el comportamiento a tiempos largos de la diferencia del desplazamiento cuadrático medio es  $MSD_{P_V} - MSD_P \sim 8Dt$ , siendo del mismo orden que el RW.

### 3.4.4. Ejemplo 4: Potencial con decaimiento exponencial

Una forma de un potencial tipo decaimiento exponencial es

$$V(x) = \lambda_1 \exp(-\lambda_2 x), \quad (3.55)$$

si consideramos un potencial de esta forma, las cantidades necesarias para la construcción de la probabilidad de transición son:

$$\mathcal{V}(x, t; x_0, t_0) = \lambda_1(t - t_0) [\exp(-\lambda_2 x) + \exp(-\lambda_2 x_0)]. \quad (3.56)$$

Para esta forma del potencial, conviene hacer la normalización a través de la Ec. (3.18), así

$$\begin{aligned} \mathcal{N}'^{-1} &= 1 + \frac{\varepsilon \lambda_1(t - t_0)}{2} \exp(-\lambda_2 x_0) \\ &\quad + \frac{\varepsilon \lambda_1(t - t_0)}{2} M_{x,P}(-\lambda_2); \end{aligned} \quad (3.57a)$$

$$\Gamma = \frac{\lambda_1(t - t_0)}{2} M_{x,P}(-\lambda_2), \quad (3.57b)$$

donde  $M_{x,P}(-\lambda_2)$  es una constante con la misma forma funcional que la función generadora de momentos de una distribución normal evaluada en  $-\lambda_2$ . Con esto, la probabilidad de transición para una perturbación de este tipo es

$$\begin{aligned} P_V(x, t; x_0, t_0) &= P(x, t; x_0, t_0) \\ &\quad - \frac{\varepsilon \lambda_1}{2} (t - t_0) \mathcal{N}' M_{x,P}(-\lambda_2) P(x, t; x_0, t_0) \\ &\quad + \frac{\varepsilon \lambda_1}{2} (t - t_0) \mathcal{N}' \exp(-\lambda_2 x) P(x, t; x_0, t_0). \end{aligned} \quad (3.58)$$

De igual manera que la constante de normalización, la función generadora de momentos conviene ser calculada a través de la Ec. (3.23), de esta

forma se encuentra que

$$M_{x,P_V}(T) = M_{x,P}(T) + \frac{\varepsilon\lambda_1}{2}(t-t_0)\mathcal{N}'M_{x,P}(-\lambda_2)M_{x,P}(T) \times \{\exp[2D(t-t_0)\lambda_2T] - 1\}. \quad (3.59)$$

Entonces, la diferencia de los momentos entre el proceso libre y el perturbado queda en función de los momentos de la distribución normal

$$E_{P_V}(X^n) - E_P(X^n) = \frac{\varepsilon\lambda_1}{2}(t-t_0)\mathcal{N}'M_{x,P}(-\lambda_2) \times \frac{d^n}{dT^n} \{M_{x,P}(T) \{\exp[2D(t-t_0)\lambda_2T] - 1\}\} \Big|_{T=0}. \quad (3.60)$$

Para este ejemplo, la diferencia del desplazamiento cuadrático medio es

$$MSD_{P_V} - MSD_P = \frac{2\varepsilon\lambda_1\lambda_2D(t-t_0)^2}{1 + \frac{\varepsilon\lambda_1(t-t_0)}{2}\exp(-\lambda_2x_0) + \frac{\varepsilon\lambda_1(t-t_0)}{2}M_{x,P}(-\lambda_2)} \times \{M_{x,P}(-\lambda_2)D(t-t_0)\lambda_2 + [M_{x,P}(-\lambda_2) - 1]x_0\}. \quad (3.61)$$

## Observaciones

En el límite  $(t-t_0) \rightarrow 0$ , la expansión en binomio de Newton de la constante de normalización a primer orden en  $\varepsilon$  es

$$\mathcal{N}' \approx 1 - \varepsilon\lambda_1(t-t_0)\exp(-\lambda_2x_0)[1 + D(t-t_0)\lambda_2], \quad (3.62)$$

donde la función generadora de momentos de la distribución normal evaluada en  $-\lambda_2$  ha sido aproximada como  $M_{x,P}(-\lambda_2) \approx \exp(-\lambda_2x_0)[1 + 2D(t-t_0)]$ . En este caso, el comportamiento a tiempos cortos de la diferencia del desplazamiento cuadrático medio es  $MSD_{P_V} - MSD_P \sim 2\varepsilon\lambda_1\lambda_2D(t-t_0)^2[\exp(-x_0\lambda_2) - 1]x_0$ . Notemos que para  $0 < x_0$ ,  $MSD_{P_V} - MSD_P < 0$ . Ésto significa que la difusión en el proceso perturbado es más lenta que un RWs. Además, en el límite  $t \rightarrow \infty$ , el comportamiento a tiempos largos de la diferencia del desplazamiento cuadrático medio es  $MSD_{P_V} - MSD_P \sim 4\lambda_2^2D^2t^2$ . Es decir, el proceso perturbado se difunde más rápido que un RWs [3.1].

### 3.4.5. Ejemplo 5: Potencial sinusoidal

El potencial que estudiaremos a continuación tiene la forma general de una función sinusoidal, esta forma tiene interés para el estudio de motores moleculares que veremos más adelante y que en particular lo usamos

para construir un potencial tipo *ratchet* como la suma de dos potenciales sinusoidales. Para este ejemplo, consideremos el siguiente potencial en una dimensión

$$V(x) = A \sin(\omega x + \delta), \quad (3.63)$$

donde  $A$ ,  $\omega$  y  $\delta$  son la amplitud, la frecuencia y la fase del potencial, respectivamente. Para este potencial, las cantidades necesarias para construir  $P_V$  son

$$\mathcal{V}(x, t; x_0, t_0) = A[\sin(\omega x + \delta) + \sin(\omega x_0 + \delta)](t - t_0); \quad (3.64a)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{N}'^{-1} &= 1 + \frac{\varepsilon}{2}(t - t_0)A \sin(\omega x_0 + \delta) \\ &\quad + \frac{\varepsilon}{2}(t - t_0)A \exp[-D(t - t_0)\omega^2] \\ &\quad \times \sin[D^{1/2}(t - t_0)^{1/2}\omega x_0 + \delta]; \end{aligned} \quad (3.64b)$$

$$\begin{aligned} \Gamma &= A \exp[-D(t - t_0)\omega^2] \\ &\quad \times \sin[D^{1/2}(t - t_0)^{1/2}\omega x_0 + \delta]. \end{aligned} \quad (3.64c)$$

Con esto, la probabilidad de transición queda como

$$\begin{aligned} P_V(x, t; x_0, t_0) &= P(x, t; x_0, t_0) - \frac{\varepsilon(t - t_0)}{2}\Gamma\mathcal{N}'P(x, t; x_0, t_0) \\ &\quad + \frac{A\varepsilon(t - t_0)}{2}\mathcal{N}' \sin(\omega x + \delta)P(x, t; x_0, t_0). \end{aligned} \quad (3.65)$$

La figura 3.7 muestra una comparación entre  $P$  y  $P_V$  para esta función de distribución de probabilidad. Además, la función generadora de momentos correspondiente a este sistema es:

$$\begin{aligned} M_{x, P_V}(T) &= M_{x, P}(T) - \frac{\varepsilon(t - t_0)}{2}\Gamma\mathcal{N}'M_{x, P}(T) \\ &\quad + \frac{A\varepsilon(t - t_0)}{2}\mathcal{N}' \exp\left[-\frac{x_0^2 - \hat{x}_0^2}{4D(t - t_0)} - D(t - t_0)\omega^2\right] \\ &\quad \times \sin\left[\delta + D^{1/2}(t - t_0)^{1/2}\omega\hat{x}_0\right], \end{aligned} \quad (3.66)$$

aquí hemos usado la notación conveniente,  $\hat{x}_0 = x_0 + 2D(t - t_0)T$ .

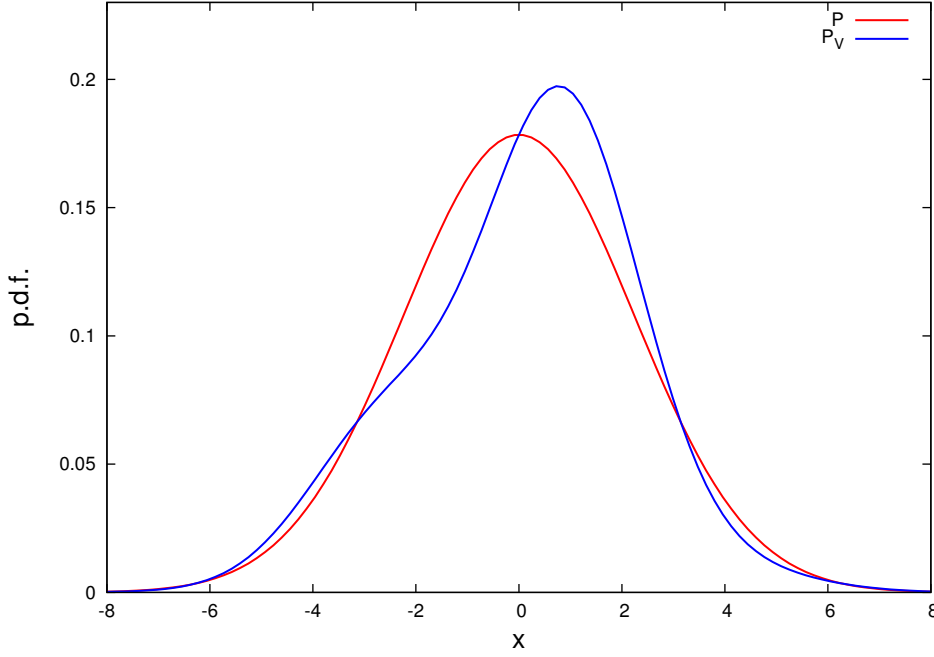


Figura 3.7: Comparación entre  $P$  y  $P_V$  para un RW bajo una perturbación generada por un campo cuyo potencial es sinusoidal. La línea roja y azul son la probabilidad de transición para  $P$  y  $P_V$  respectivamente. Para construir  $P_V$  se consideraron los siguientes parámetros:  $x_0 = 0$ ,  $A = 1$ ,  $\varepsilon = 0.1$ ,  $D = 1$ ,  $\delta = 0$ ,  $\omega = 1$ ,  $t_0 = 0$  y  $t = 5$ .

### Primer momento

La diferencia del primer momento calculada usando la Ec. (3.31) es

$$\begin{aligned}
 E_{P_V}(X) - E_P(X) &= -\frac{\varepsilon(t-t_0)}{2} \Gamma \mathcal{N}' E_P(X) + \frac{A\varepsilon D(t-t_0)^2}{2} \mathcal{N}' \\
 &\times \exp[-D(t-t_0)\omega^2] \left\{ D^{1/2}(t-t_0)^{1/2}\omega \cos\left[\delta + D^{1/2}(t-t_0)^{1/2}\omega x_0\right] \right. \\
 &\quad \left. + x_0 \sin\left[\delta + D^{1/2}(t-t_0)^{1/2}\omega x_0\right] \right\}. \quad (3.67)
 \end{aligned}$$

La figura 3.8 muestra la trayectoria promedio para un RW inmerso en un potencial perturbativo sinusoidal considerando los siguientes parámetros  $x_0 = 0$ ,  $A = 1$ ,  $D = 1$ ,  $\delta = 0$ ,  $\omega = 1$ ,  $t_0 = 0$ .

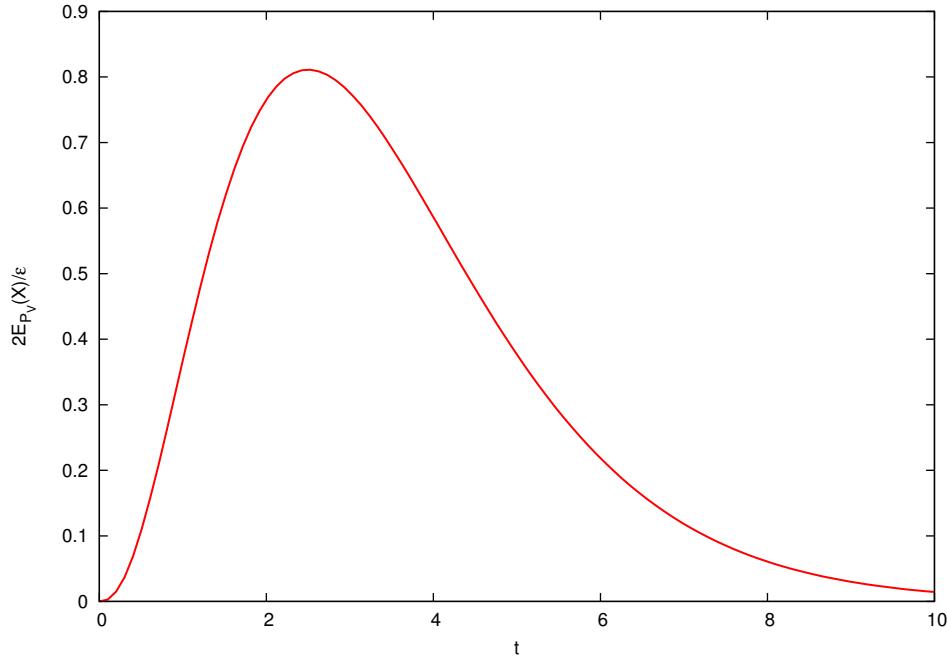


Figura 3.8: Primer momento de  $P_V$  para un potencial sinusoidal con los mismos parámetros que en la figura 3.7.

### Segundo momento

La diferencia del segundo momento calculada usando la Ec. (3.36) es

$$\begin{aligned}
 E_{P_V}(X^2) - E_P(X^2) &= -\frac{\varepsilon(t-t_0)}{2}\Gamma\mathcal{N}'E_P(X^2) + A\varepsilon D(t-t_0)^2\mathcal{N}' \\
 &\times \exp[-D(t-t_0)\omega^2] \left\{ \sin\left[\delta + D^{1/2}(t-t_0)^{1/2}\omega x_0\right] \right. \\
 &\times \left(1 + \frac{x_0^2}{2D(t-t_0)} - D^2(t-t_0)^2\right) \\
 &+ \cos\left[\delta + D^{1/2}(t-t_0)^{1/2}\omega x_0\right] \\
 &\left. \times \left(x_0 D^{1/2}(t-t_0)^{1/2} + \frac{x_0\omega}{2D^{1/2}(t-t_0)^{1/2}}\right) \right\}. \quad (3.68)
 \end{aligned}$$

### Observaciones

Por simplicidad, consideremos  $x_0 = 0$  y  $t_0 = 0$ , con esto, tenemos las siguientes simplificaciones:

1. La posición promedio (el primer momento) queda como

$$E_{P_V}(X) = \frac{\varepsilon A \omega \cos(\delta) D^{3/2} t^{5/2} \exp(-Dt\omega^2)}{2 + \varepsilon \sin(\delta)t + \varepsilon A \sin(\delta)t \exp(-Dt\omega^2)}, \quad (3.69)$$

en particular, si  $\delta = 0$ , obtenemos la posición promedio de la figura 3.8.

2. Bajo estas condiciones, la diferencia del desplazamiento cuadrático medio queda como

$$MSD_{P_V} - MSD_P = -\frac{\varepsilon A \sin(\delta) D^3 t^4 \exp(-Dt\omega^2)}{1 + \frac{\varepsilon}{2} \sin(\delta)t + \frac{\varepsilon}{2} A \sin(\delta)t \exp(-Dt\omega^2)}. \quad (3.70)$$

En el límite  $t \rightarrow 0$ , el comportamiento a tiempos cortos de la diferencia del desplazamiento cuadrático medio es  $MSD_{P_V} - MSD_P \sim -\varepsilon A \sin(\delta) D^3 t^4$ . De manera general, en este límite, la diferencia del desplazamiento cuadrático medio depende explícitamente de  $\delta$ . Para  $\delta = k\pi$  con  $k$  un número entero,  $MSD_{P_V} - MSD_P = 0$ , entonces el proceso perturbado se propagará como un RWs. Para  $0 < \delta < \pi$ ,  $\sin(\delta) > 0$ , así  $MSD_{P_V} - MSD_P < 0$ , significando que el proceso perturbado se propagará más lentamente que un RWs. En cambio, si  $\pi < \delta < 2\pi$ ,  $\sin(\delta) < 0$ , por lo que  $MSD_{P_V} - MSD_P > 0$ , entonces el proceso perturbado se propagará más rápido que un RWs. Además, en el límite  $t \rightarrow \infty$ ,  $MSD_{P_V} - MSD_P = 0$ , entonces el proceso perturbado se propagará como un RWs sin importar el valor de  $\delta$ .

# Bibliografía

- [3.1] J. E. Ramírez, J. N. Herrera, and M. I. Martínez, “[Getting a stochastic process from a conservative Lagrangian: A first approach](#),” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 448, pp. 1 – 9, 2016.
- [3.2] S. Brush, “[Functional integrals and statistical physics](#),” *Reviews of Modern Physics*, vol. 33, no. 1, p. 79, 1961.
- [3.3] M. Kac, “[On distributions of certain Wiener functionals](#),” *T. Am. Math. Soc.*, vol. 65, no. 1, pp. 1–13, 1949.
- [3.4] C. Itzykson and J. Drouffe, *Statistical Field Theory: Volume 1, From Brownian Motion to Renormalization and Lattice Gauge Theory*. Cambridge Monographs on Mathematical Physics, Cambridge University Press, 1991.
- [3.5] X. Michalet, “[Mean square displacement analysis of single-particle trajectories with localization error: Brownian motion in an isotropic medium](#),” *Phys. Rev. E*, vol. 82, p. 041914, 2010.
- [3.6] G. Pavliotis, *Stochastic Processes and Applications: Diffusion Processes, the Fokker-Planck and Langevin Equations*. Texts in Applied Mathematics, Springer New York, 2014.
- [3.7] G. Grimmett and D. Welsh, *Probability: An Introduction*. OUP Oxford, 2014.



# Capítulo 4

## El RW con superposición de fuerzas

En la naturaleza es frecuente encontrar sistemas en los que el objeto de interés está sometido a más de una fuerza. Y las partículas brownianas no son la excepción. En este capítulo, usaremos los resultados que ya obtuvimos en el capítulo anterior para escribir la probabilidad de transición de un RW sometido a una superposición de fuerzas. Aplicaremos los resultados obtenidos hasta el momento a los procesos de Ornstein-Uhlenbeck, al potencial biestable y al potencial seno+seno que es usado para modelar el *ratchet* (proteínas motoras, motores brownianos, motores moleculares, entre otros sistemas).

### 4.1. $P_V$ para una superposición de fuerzas conservativas

Consideremos una partícula browniana sometida a  $n$  fuerzas conservativas, de esta forma, la fuerza neta aplicada es

$$\mathbf{F} = \sum_{k=1}^n \mathbf{F}_k. \quad (4.1)$$

Como cada una de las fuerzas  $\mathbf{F}_k$  es conservativa, entonces pueden ser expresadas a través del gradiente de un potencial, de esta forma, la función

que define a la fuerza  $\mathbf{F}$  es

$$V = \sum_{k=1}^n V_k, \quad (4.2)$$

donde  $V_k$  es el potencial de la fuerza  $\mathbf{F}_k$ . Notemos que si sustituimos esta última forma de potencial en la Ec. (3.11), la probabilidad de transición queda como sigue

$$P_V \propto \exp \left[ -\frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^2}{4D(t - t_0)} \right] \exp \left[ \frac{\varepsilon(t - t_0)}{2} \sum_{k=1}^n \mathcal{V}_k \right]. \quad (4.3)$$

La aproximación a primer orden de la exponencial que contiene la información sobre la interacción de RW con el campo externo es  $1 + \varepsilon(t - t_0) \sum_{k=1}^n \mathcal{V}_k/2$ , donde no aparecen términos de productos cruzados de la forma  $V_i V_k$  ya que éstos contribuyen en la aproximación a segundo orden en  $\varepsilon$ .

Hemos encontrado que la probabilidad de transición para un RW sometido a un potencial débil con constante de acoplamiento  $\varepsilon \ll 1$ , en primera aproximación es

$$P_V = P - \frac{\varepsilon}{2}(t - t_0)\mathcal{N}'\Gamma P + \frac{\varepsilon}{2}(t - t_0)\mathcal{N}'VP, \quad (4.4)$$

donde  $P$  es la probabilidad de transición para un RW simple,  $\mathcal{N}'$  es la constante de normalización del proceso  $P_V$  y  $\Gamma = \int_{V_\infty} d\mathbf{x}VP$ . Dadas las propiedades de la integral, se encuentra que

$$\Gamma = \sum_{k=1}^n \Gamma_k, \quad (4.5)$$

donde cada  $\Gamma_k$  es la integral para cada potencial  $V_k$  con el peso estadístico  $P$ . De manera general, encontramos que la constante de normalización se calcula como

$$\mathcal{N}'^{-1} = 1 + \frac{\varepsilon(t - t_0)}{2}V(\mathbf{x}_0) + \frac{\varepsilon(t - t_0)}{2}\Gamma, \quad (4.6)$$

donde  $V(\mathbf{x}_0) = \sum_{k=1}^n V_k(\mathbf{x}_0)$ , de esta forma encontramos que

$$\mathcal{N}'^{-1} = 1 + \frac{\varepsilon(t - t_0)}{2} \sum_{k=1}^n [V_k(\mathbf{x}_0) + \Gamma_k], \quad (4.7)$$

además,

$$\frac{\varepsilon(t - t_0)}{2} [V_k(\mathbf{x}_0) + \Gamma_k] = \mathcal{N}'_k{}^{-1} - 1, \quad (4.8)$$

donde las  $\mathcal{N}'_k{}^{-1}$  son las constantes de normalización para las probabilidades de transición  $P_{V_k}$  de una partícula browniana sometida a la perturbación generada por el potencial  $V_k$ . Así, la constante de normalización para la probabilidad de transición  $P_V$  se expresa como

$$\mathcal{N}'^{-1} = 1 - n + \sum_{k=1}^n \mathcal{N}'_k{}^{-1}, \quad (4.9)$$

de esta forma  $\mathcal{N}'^{-1}$  ha sido escrita en función de las  $\mathcal{N}'_k{}^{-1}$ .

Ahora, la probabilidad de transición  $P_V$  puede ser escrita como sigue

$$P_V = P + \frac{\varepsilon(t - t_0)}{2} \mathcal{N}' P \sum_{k=1}^n (V_k - \Gamma_k), \quad (4.10)$$

pero la aproximación para  $P_{V_k}$  es

$$P_{V_k} = P + \frac{\varepsilon(t - t_0)}{2} \mathcal{N}'_k P (V_k - \Gamma_k), \quad (4.11)$$

así que

$$P_V = P + \sum_{k=1}^n w_k (P_{V_k} - P), \quad (4.12)$$

con esto,  $P_V$  es escrito como una combinación lineal de las desviaciones de  $P_{V_k}$  respecto a  $P$ , donde las constantes  $w_k = \mathcal{N}' / \mathcal{N}'_k$  puede ser interpretada como la constante de normalización  $\mathcal{N}'$  ponderada a través de la constante de normalización  $\mathcal{N}'_k$  de la  $k$ -ésima interacción. De la Ec. (4.12), inmediatamente se encuentra que la función generadora de momentos es

$$M_{\mathbf{x}, P_V} = M_{\mathbf{x}, P} + \sum_{k=1}^n w_k \left( M_{\mathbf{x}, P_{V_k}} - M_{\mathbf{x}, P} \right), \quad (4.13)$$

y el  $l$ -ésimo momento es calculado a través de

$$E_{P_V}(X^l) = E_P(X^l) + \sum_{k=1}^n w_k \left( E_{P_{V_k}}(X^l) - E_P(X^l) \right). \quad (4.14)$$

En particular, el desplazamiento cuadrático medio puede ser calculado como

$$MSD_{P_V} = MSD_P + \sum_{k=1}^n w_k \left( MSD_{P_{V_k}} - MSD_P \right). \quad (4.15)$$

Notemos que las Eqs. (4.13), (4.14) y (4.15) también han sido escritas en una forma de combinación lineal de las desviaciones de la función generadora de momentos, los momentos y el MSD de las  $P_{V_k}$  respecto al proceso libre  $P$ , respectivamente. Con estos resultados, podemos describir completamente las propiedades de un RW inmerso en una fuerza neta  $\mathbf{F}$  a través de la descripción de cada uno de los sumandos que la componen. En las siguientes secciones aplicaremos estos resultados para construir una descripción para el proceso de Ornstein-Uhlenbeck, el potencial biestable y el potencial seno+seno, a través de los resultados ya obtenidos en el capítulo anterior para los potenciales lineal, oscilador armónico, cuártico y sinusoidal.

## 4.2. Proceso de Ornstein-Uhlenbeck

El proceso de Ornstein-Uhlenbeck es un proceso estocástico que consiste en someter a una partícula browniana a una fuerza externa de la forma  $F = \kappa_1 - \kappa_2 x$  [4.1], de esta forma, podemos escribir el potencial externo (dado que la fuerza lineal y el potencial de oscilador armónico son fuerzas conservativas) de la forma general

$$V(x) = \frac{\kappa_2}{2} x^2 - \kappa_1 x, \quad (4.16)$$

donde los potenciales lineal y cuadrático ya los hemos estudiado por separado en el capítulo anterior. En esta sección consideraremos un RW inmerso en el potencial de la Ec. (4.16), el cual podemos escribir como  $V = V_1 + V_2$ , donde  $V_1$  es el potencial lineal, mientras que  $V_2$  es el potencial cuadrático. Por simplicidad, consideraremos el caso unidimensional.

### 4.2.1. $P_V$ para el proceso de Ornstein-Uhlenbeck

Ahora, con los resultados para el potencial lineal (considerando el cambio  $\kappa \rightarrow -\kappa_1$ ) y cuadrático (considerando el cambio  $\kappa \rightarrow \kappa_2/2$ ), podemos construir la probabilidad de transición para el proceso de Ornstein-Uhlenbeck. Comencemos con la construcción de  $\Gamma$  considerando las Ecs. (3.28c)

y (3.40c), al introducir las en Ec. (4.5), obtenemos

$$\Gamma = \frac{\kappa_2}{2}x_0^2 + \frac{\kappa_2}{2}D(t-t_0) - \kappa_1x_0. \quad (4.17)$$

Si sustituimos las Ecs. (3.28b) y (3.40b) en (4.9), la constante de normalización para el proceso de Ornstein-Uhlenbeck es:

$$\mathcal{N}'^{-1} = 1 + \varepsilon \left( \frac{\kappa_2}{2}x_0^2 - \kappa_1x_0 \right) (t-t_0) + \frac{\varepsilon\kappa_2}{2}D(t-t_0)^2. \quad (4.18)$$

Mientras que las constantes  $w_k$  de la Ec. (4.12) son:

$$w_1 = \frac{1 - \varepsilon\kappa_1x_0(t-t_0)}{1 + \varepsilon \left( \frac{\kappa_2}{2}x_0^2 - \kappa_1x_0 \right) (t-t_0) + \frac{\varepsilon\kappa_2}{2}D(t-t_0)^2}; \quad (4.19a)$$

$$w_2 = \frac{1 + \frac{\varepsilon\kappa_2}{2}x_0^2(t-t_0) + \frac{\varepsilon\kappa_2}{2}D(t-t_0)}{1 + \varepsilon \left( \frac{\kappa_2}{2}x_0^2 - \kappa_1x_0 \right) (t-t_0) + \frac{\varepsilon\kappa_2}{2}D(t-t_0)^2}. \quad (4.19b)$$

Si sustituimos las expresiones para  $P_{V_1}$  (Ec. (3.29)) y  $P_{V_2}$  (Ec. (3.41)) en la Ec. (4.12), además de las expresiones para las  $w_k$ , la probabilidad de transición para el proceso de Ornstein-Uhlenbeck es

$$P_V = P + \frac{\frac{\varepsilon}{2} \left[ \frac{\kappa_2}{2}(x^2 - x_0^2) - \kappa_1(x - x_0) \right] (t-t_0) - \frac{\varepsilon\kappa_2}{4}D(t-t_0)^2}{1 + \varepsilon \left( \frac{\kappa_2}{2}x_0^2 - \kappa_1x_0 \right) (t-t_0) + \frac{\varepsilon\kappa_2}{2}D(t-t_0)^2}P. \quad (4.20)$$

La figura 4.1 muestra una comparación entre  $P$  (línea roja) y  $P_V$  (línea azul) para este ejemplo. Notemos que  $P_V$  muestra una clara asimetría, tal como ocurre con la solución gaussiana típica del proceso de Ornstein-Uhlenbeck [4.2]. La figura 4.2 muestra la evolución temporal de  $P_V$  para el proceso de Ornstein-Uhlenbeck. Recordemos el ejemplo del potencial lineal, en donde la posición promedio muestra un corrimiento de acuerdo con el signo de  $\kappa$  (ver Ec. (3.34)). En este caso, la constante del potencial lineal tiene signo negativo. Como podemos observar, la evolución de  $P_V$  muestra un corrimiento a la izquierda, el cual concuerda con dicho signo. Además, de acuerdo con el comportamiento del segundo momento del RW inmerso en un potencial cuadrático, la dispersión del proceso también aumenta. A continuación, estudiaremos de manera analítica tales comportamientos.

## 4.2.2. Valores promedio y comportamientos asintóticos

Como los momentos de las diferentes funciones de distribución de probabilidad los podemos escribir de manera inmediata a través de la Ec. (4.14)

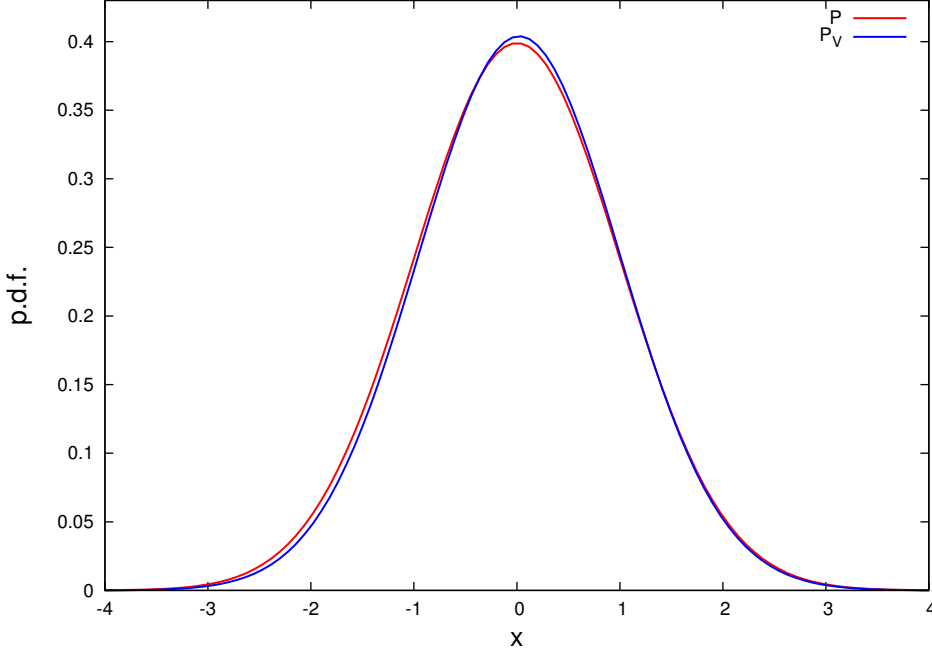


Figura 4.1: Comparación entre  $P$  y  $P_V$  para el proceso de Ornstein-Uhlenbeck. La línea roja y azul son la probabilidad de transición para  $P$  y  $P_V$  respectivamente. Para construir  $P_V$  se consideraron los siguientes parámetros:  $x_0 = 0$ ,  $\kappa = 1$ ,  $\kappa_2 = 2$ ,  $\varepsilon = 0.1$ ,  $D = 1$  y  $2Dt = 1$ .

sin necesidad de escribir la función generadora de momentos, y como ya hemos calculado los primeros dos momentos para el potencial lineal y de oscilador armónico, así, usando las Ecs. (3.33) y (3.43) en la Ec. (4.14), encontramos que la posición promedio (primer momento de  $P_V$ ) para el proceso de Ornstein-Uhlenbeck es

$$E_{P_V}(X) - E_P(X) = \frac{\varepsilon D(t - t_0)^2(\kappa_2 x_0 - \kappa_1)}{1 + \varepsilon \left( \frac{\kappa_2}{2} x_0^2 - \kappa_1 x_0 \right) (t - t_0) + \frac{\varepsilon \kappa_2}{2} D(t - t_0)^2}. \quad (4.21)$$

En el límite de tiempos cortos

$$E_{P_V}(X) - E_P(X) \sim \varepsilon D(t - t_0)^2(\kappa_2 x_0 - \kappa_1), \quad (4.22)$$

mientras que en límite de tiempos largos

$$E_{P_V}(X) - E_P(X) \sim x_0 - \frac{2\kappa_1}{\kappa_2}. \quad (4.23)$$

La figura 4.3 muestra los comportamientos asintóticos de la posición promedio para el proceso de Ornstein-Uhlenbeck para diferentes posiciones

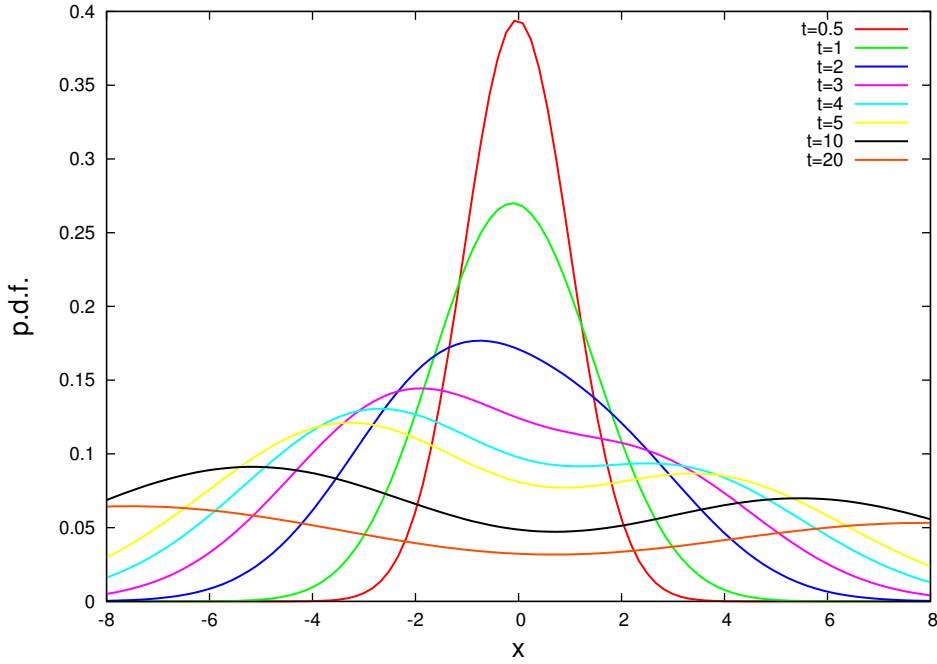


Figura 4.2: Evolución temporal de  $P_V$  para el proceso de Ornstein-Uhlenbeck. Para construir  $P_V$  se consideraron los siguientes parámetros:  $x_0 = 0$ ,  $t_0 = 0$ ,  $\kappa = 1$ ,  $\kappa_2 = 2$ ,  $\varepsilon = 0.1$  y  $D = 1$ .

iniciales. En particular, si  $x_0 = 0$ , en el límite de tiempos cortos, la posición promedio es  $E_{P_V}(X) - E_P(X) \sim -\varepsilon\kappa_1 D(t - t_0)^2$ , en este caso particular, la partícula browniana actúa como si solo estuviera bajo la presencia del potencial lineal. Sin embargo, para  $x_0$  arbitrario, en este mismo límite, la partícula actúa como si estuviera inmersa en un potencia efectivo lineal con magnitud  $\kappa_2 x_0 - \kappa_1$  (ver Ec. (3.33)). Además, para cualesquiera valores de  $\kappa_1$  y  $\kappa_2$  existe una posición inicial dada por  $x_0 = \kappa_1/\kappa_2$  tal que la posición promedio es  $E_{P_V}(X) - E_P(X) = 0$  para todo  $t$ . En este punto en particular, la partícula browniana parece que se encuentra en un estado de “equilibrio”.

Ahora, sin necesidad de calcular el segundo momento, podemos determinar la diferencia del desplazamiento cuadrático medio de la probabilidad de transición para el proceso de Ornstein-Uhlenbeck respecto al proceso libre sustituyendo las Ecs. (3.39) y (3.45) la Ec. (4.15), así

$$MSD_{P_V} - MSD_P = \frac{2\varepsilon\kappa_2 D^2 (t - t_0)^3}{1 + \varepsilon \left( \frac{\kappa_2}{2} x_0^2 - \kappa_1 x_0 \right) (t - t_0) + \frac{\varepsilon\kappa_2}{2} D (t - t_0)^2}. \quad (4.24)$$

En el límite de tiempos cortos, tenemos que  $MSD_{P_V} - MSD_P \sim 2\varepsilon\kappa_2 D^2 (t - t_0)^3$ . En cambio, en el límite de tiempos largos  $MSD_{P_V} - MSD_P \sim 4Dt$ .

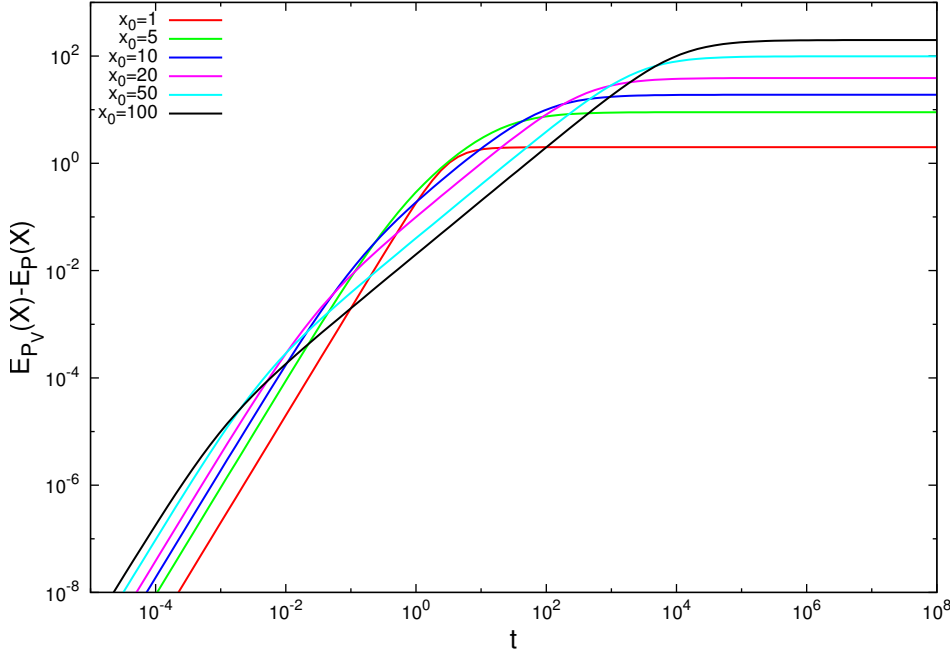


Figura 4.3: Comportamiento asintótico de  $E_{P_V}(X) - E_P(X)$  para el proceso de Ornstein-Uhlenbeck considerando diferentes posiciones iniciales  $x_0$ . Para construir  $P_V$  se consideraron los siguientes parámetros:  $\kappa = 1$ ,  $\kappa_2 = 2$ ,  $\varepsilon = 0.1$  y  $D = 1$ .

Ambos comportamientos asintóticos no dependen de  $x_0$ . En cambio, existe una escala de tiempo intermedia (entre tiempos cortos y tiempos largos) que depende de  $x_0$ , en la que el término lineal del denominador es más grande que el término cuadrático. En esta escala de tiempo  $MSD_{P_V} - MSD_P \sim t^2$ . La figura 4.4 muestra los comportamientos asintóticos del desplazamiento cuadrático medio como función de  $x_0 \geq 1$ . Se puede observar que solo existen dos regiones para la diferencia del desplazamiento cuadrático medio para  $x_0 \sim 2$ . En cambio, para  $x_0 > 2$ , se observa la aparición del régimen de difusión balística ( $\sim t^2$ ).

### 4.3. Potencial 2-4

El movimiento traslacional de una partícula browniana en un potencial 2-4 de la forma

$$V(x) = Ax^2 + Bx^4, \quad (4.25)$$

donde  $A$  y  $B$  son constantes,  $-\infty < x < \infty$ , es frecuentemente usada para describir el movimiento aleatorio en una gran variedad de sistemas físicos

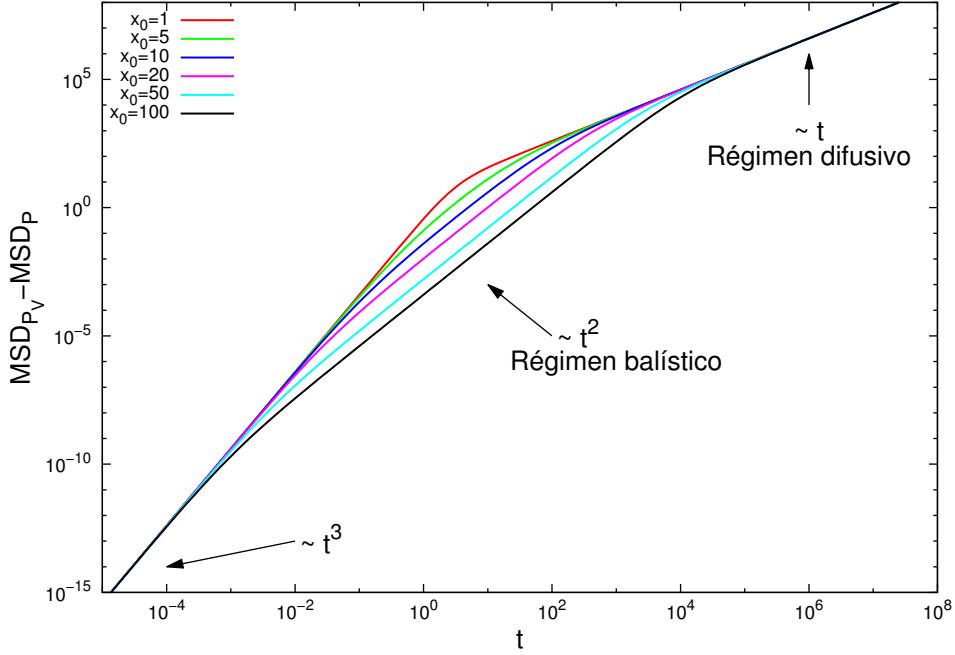


Figura 4.4: Comportamiento asintótico de  $E_{P_V}(X) - E_P(X)$  para el proceso de Ornstein-Uhlenbeck considerando diferentes posiciones iniciales  $x_0$ . Para construir  $P_V$  se consideraron los siguientes parámetros:  $t_0 = 0$ ,  $\kappa = 1$ ,  $\kappa_2 = 2$ ,  $\varepsilon = 0.1$  y  $D = 1$ .

y químicos (por ejemplo: [4.3–4.5]). El proceso de relajación dinámica del modelo con límite de fricción grande, donde la inercia de una partícula puede ser despreciada, se resuelve usando la teoría de estados de transición de Kramers [4.6] o a través de las soluciones de la ecuación de Smoluchowski (ver refs. [4.7–4.12]). El número de artículos dedicados para resolver este problema es muy grande y existen varias soluciones ya que éste es de fundamental importancia en fisicoquímica para modelar las transiciones de cruce de barreras de potencial, por ejemplo: el transporte de polímeros a través de membranas, electroforesis, transporte de células o vesículas en canales estrechos, entre otros [4.13, 4.14]. En esta sección, utilizaremos los resultados que ya obtuvimos en el capítulo anterior para los potenciales cuadrático y cuártico para construir una aproximación de la probabilidad de transición para un RW inmerso en un potencial 2-4.

### 4.3.1. $P_V$ para el potencial 2-4

Para construir  $P_V$ , llamemos  $V_1$  y  $V_2$  al potencial cuadrático y cuártico respectivamente. Ahora, sustituyendo las Ecs. (3.40c) y (3.47c) en Ec. (4.5),

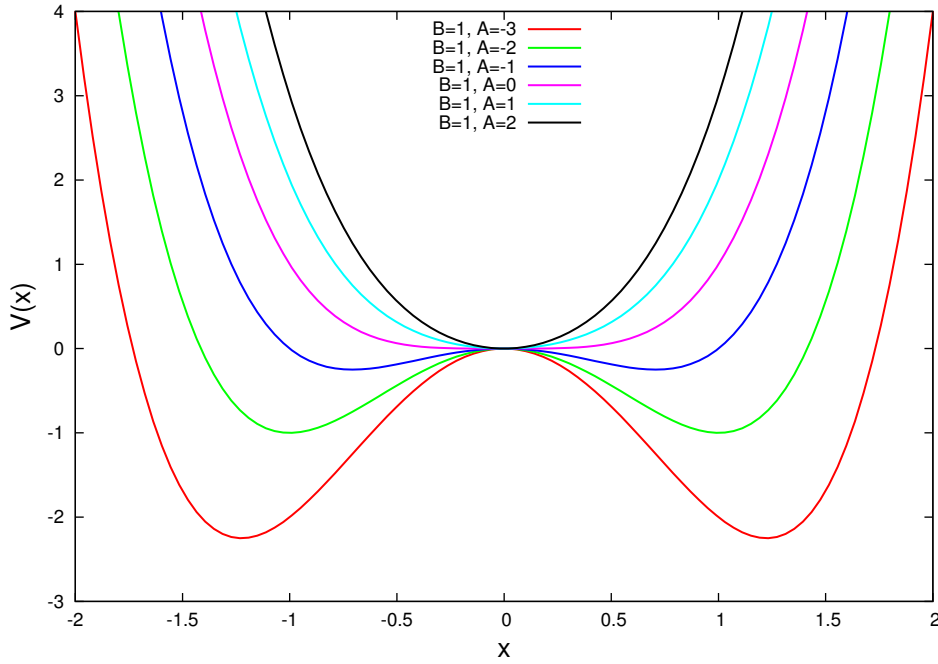


Figura 4.5: Potencial 2-4 para  $B = 1$  y diferentes valores de  $A$ .

obtenemos

$$\Gamma = Bx_0^4 + x_0^2 [12BD(t - t_0) + A] + 2D(t - t_0) [6BD(t - t_0) + A]. \quad (4.26)$$

La constante de normalización la determinamos sustituyendo las Ecs. (3.40b) y (3.47b) en Ec. (4.9), obtenemos

$$\mathcal{N}'^{-1} = 1 + \varepsilon B(t - t_0)x_0^4 + \varepsilon(t - t_0) [A + 6BD(t - t_0)] [x_0^2 + D(t - t_0)]. \quad (4.27)$$

Y las constantes  $w_k$  son

$$w_1 = \mathcal{N}' [1 + \varepsilon A(t - t_0)x_0^2 + \varepsilon AD(t - t_0)]; \quad (4.28a)$$

$$w_2 = \mathcal{N}' [1 + \varepsilon B(t - t_0)x_0^4 + 6\varepsilon BD(t - t_0)^2[x_0^2 + D(t - t_0)]]; \quad (4.28b)$$

Finalmente, la probabilidad de transición es

$$P_V = P + \left[ \frac{\varepsilon A}{2}(x^2 - x_0^2)(t - t_0) + \frac{\varepsilon B}{2}(x^4 - x_0^4)(t - t_0) - \varepsilon AD(t - t_0) - 6\varepsilon BD(t - t_0)^2[x_0^2 + D(t - t_0)] \right] \mathcal{N}' P. \quad (4.29)$$

La figura 4.6 muestra una comparación de  $P_V$  para diferentes valores de

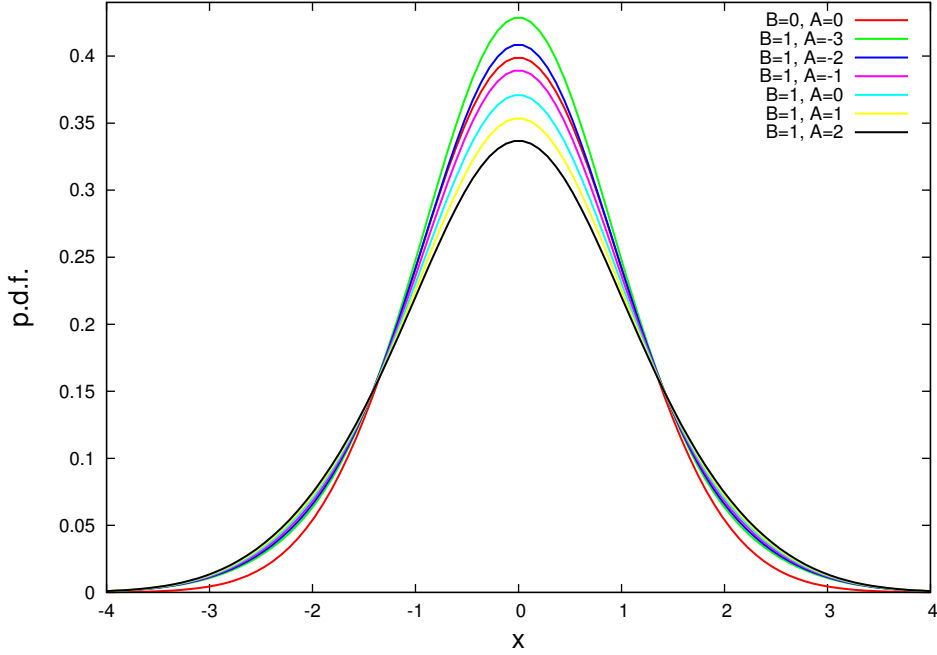


Figura 4.6: Comparación entre  $P$  y  $P_V$  para el potencial 2-4. La línea roja es la probabilidad de transición para  $P$ . Las líneas restantes son  $P_V$  para diferentes valores de  $A$ . Para construir  $P_V$  se consideraron los siguientes parámetros:  $x_0 = 0$ ,  $B = 1$ ,  $\varepsilon = 0.1$ ,  $D = 1$  y  $2Dt = 1$ .

$A$  y  $B = 1$ . La línea roja muestra la probabilidad de transición del proceso libre. La figura 4.7 muestra la evolución temporal de  $P_V$  para este ejemplo. En particular, para  $x_0 = 0$ , debido a la simetría de  $P_V$  podemos adelantar que en este caso, el primer momento de la probabilidad de transición es cero. Para los primeros instantes de la evolución temporal, se observa que la posición más probable del RW es en  $x_0 = 0$ . Conforme pasa el tiempo, el RW brinca una barrera de potencial y se aleja del origen. Tal como se muestra en la figura 4.5, el potencial 2-4 es simétrico, esto se ve reflejado en que el RW no tenga una dirección preferencial, por lo que si el RW parte de  $x_0 = 0$  se observa la simetría axial como la que muestra  $P_V$  para  $t > 2$  (ver figura 4.7).

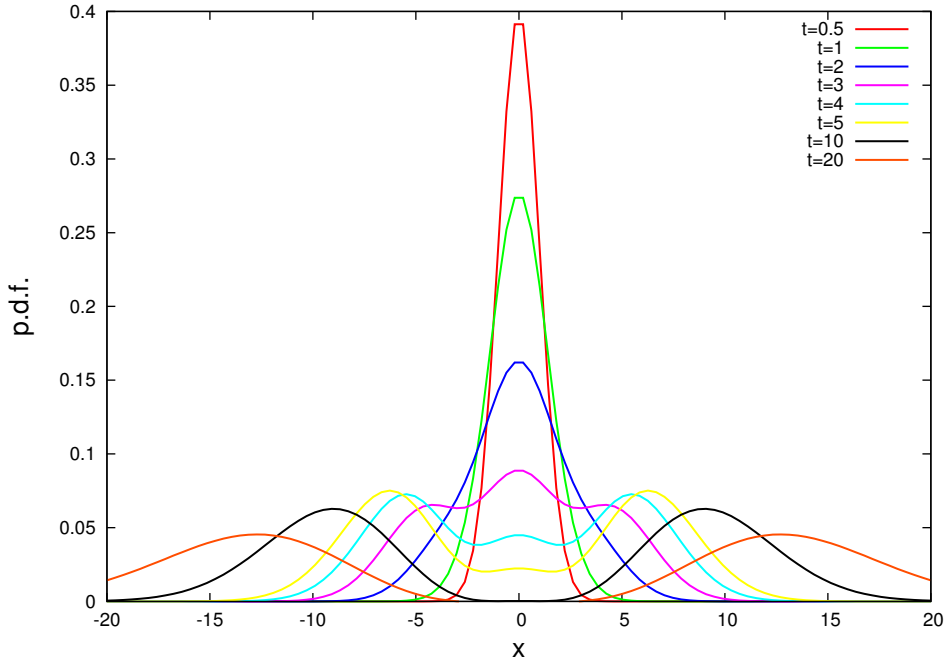


Figura 4.7: Evolución temporal de  $P_V$  para el RW inmerso en un potencial 2-4. Para construir  $P_V$  se consideraron los siguientes parámetros:  $x_0 = 0$ ,  $t_0 = 0, B = 1, A = -2, \varepsilon = 0.005$  y  $D = 1$ .

### 4.3.2. Valores promedio y comportamientos asintóticos

Sustituyendo las Ecs. (3.43) y (3.51) en la Ec. (4.14), encontramos que la posición promedio es

$$E_{P_V}(X) - E_P(X) = 2\varepsilon x_0 D(t - t_0)^2 [A + 2Bx_0^2 + 12D(t - t_0)] \mathcal{N}'. \quad (4.30)$$

En particular, si  $x_0 = 0$ ,  $E_{P_V}(X) - E_P(X) = 0$ , lo cual es una consecuencia de la simetría de  $P_V$ , tal como se muestra en la figura 4.7. En el límite de tiempos cortos,  $E_{P_V}(X) - E_P(X) \sim 2\varepsilon Ax_0 D(t - t_0)^2$ . En este límite, la partícula browniana solo siente la presencia perturbativa del potencial cuadrático. Mientras que en el límite de tiempos largos  $E_{P_V}(X) - E_P(X) \sim 4x_0/B$ . La figura 4.8 muestra los comportamientos asintóticos de  $E_{P_V}(X) - E_P(X)$  para este ejemplo.

Además, la diferencia del desplazamiento cuadrático medio es

$$MSD_{P_V} - MSD_P = [4\varepsilon AD^2(t - t_0)^3 + 24\varepsilon Bx_0^2 D^2(t - t_0)^3 + 48\varepsilon BD^3(t - t_0)^4] \mathcal{N}'. \quad (4.31)$$

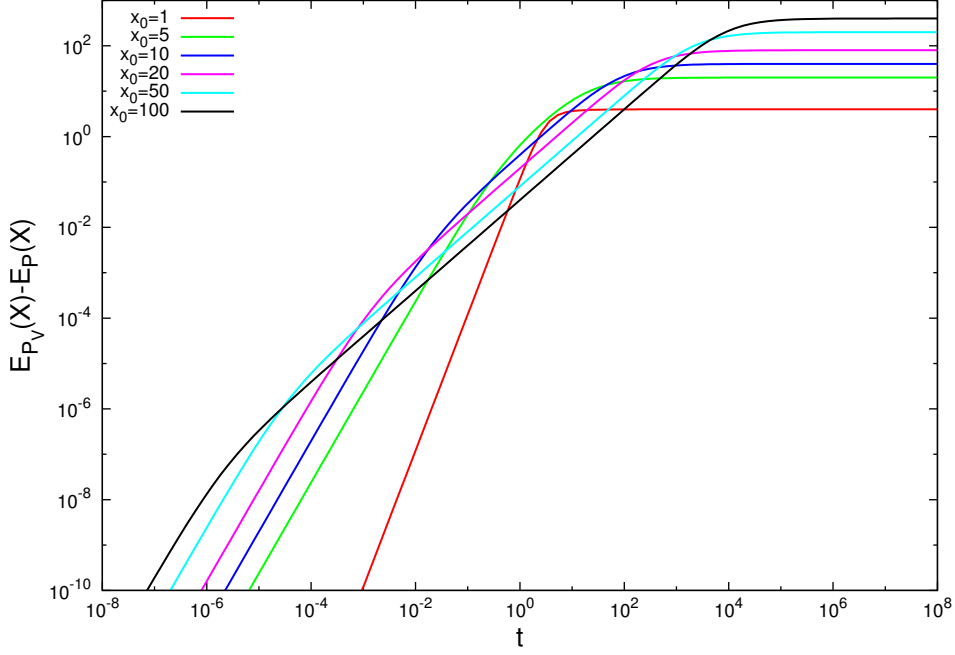


Figura 4.8: Comportamiento asintótico de  $E_{P_V}(X) - E_P(X)$  para el RW inmerso en un potencial 2-4. Para construir  $P_V$  se consideraron los siguientes parámetros:  $x_0 = 0$ ,  $t_0 = 0$ ,  $B = 1$ ,  $A = -2$ ,  $\varepsilon = 0.005$  y  $D = 1$ .

Sus comportamientos asintóticos son: En el límite de tiempos cortos, encontramos que  $MSD_{P_V} - MSD_P \sim 4\varepsilon D^2(t - t_0)^3(A + 6Bx_0^2)$ . Mientras que en el límite de tiempos largos  $MSD_{P_V} - MSD_P \sim 8Dt$ . En este límite, el proceso se propaga como un RWs. La figura 4.9 muestra el comportamiento asintótico de la diferencia del desplazamiento cuadrático medio para un RW inmerso en un potencial 2-4. Notemos que existen de manera general dos regiones con diferentes pendientes. Para tiempos cortos, observamos que el proceso es súper-difusivo ya que es del orden de  $t^3$ , mientras que para tiempos largos, el desplazamiento cuadrático medio es del orden de  $t$ , siendo éste un régimen difusivo.

## 4.4. Potencial seno+seno

Los fenómenos tales como el movimiento de músculos o la operación de motores moleculares son aplicaciones biológicas que involucran el transporte de partículas a lo largo de estructuras periódicas en aparente ausencia de cualquier fuerza impulsora externa [4.15]. La capacidad que tienen las partículas brownianas para extraer trabajo de las fluctuaciones en los es-

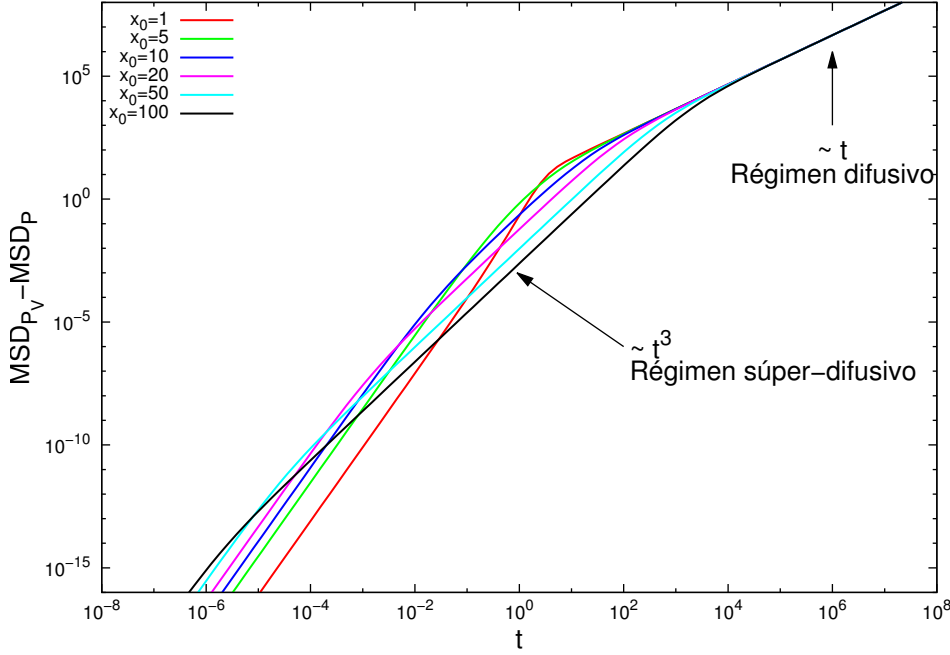


Figura 4.9: Comportamiento asintótico de  $MSD_{P_V} - MSD_P(X)$  para el RW inmerso en un potencial 2-4 con diferentes posiciones iniciales. Para construir  $P_V$  se consideraron los siguientes parámetros:  $t_0 = 0$ ,  $B = 1$ ,  $A = -2$ ,  $\varepsilon = 0.005$  y  $D = 1$ .

tados fuera de equilibrio cuando se encuentran en una estructura periódica con rompimiento espacial de la simetría (sistemas *ratchets*) [4.16] puede ser inducida por la aplicación de fuerzas no térmicas [4.17–4.19] o con la ayuda de fuerzas periódicas coherentes [4.15, 4.18]. Un ejemplo típico de potencial periódico que muestra un rompimiento de la simetría espacial es

$$V(x) = V_0 \left[ \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) + \frac{1}{4} \sin\left(\frac{4\pi x}{L}\right) \right], \quad (4.32)$$

el cual tiene periodo  $L$ . Este tipo de potenciales son llamados los potenciales de *ratchet* [4.20]. La figura 4.10 muestra la gráfica del potencial seno+seno de la Ec. (4.32) en su forma adimensional. Por simplicidad, consideremos un potencial en unidades adimensionales con un coeficiente de asimetría  $k$  de la siguiente forma [4.21, 4.22]

$$V(x) = \sin(2\pi x) + k \sin(4\pi x), \quad (4.33)$$

con esta última expresión podemos construir la probabilidad de transición para un RW inmerso en un potencial de *ratchet*. En el resto de la

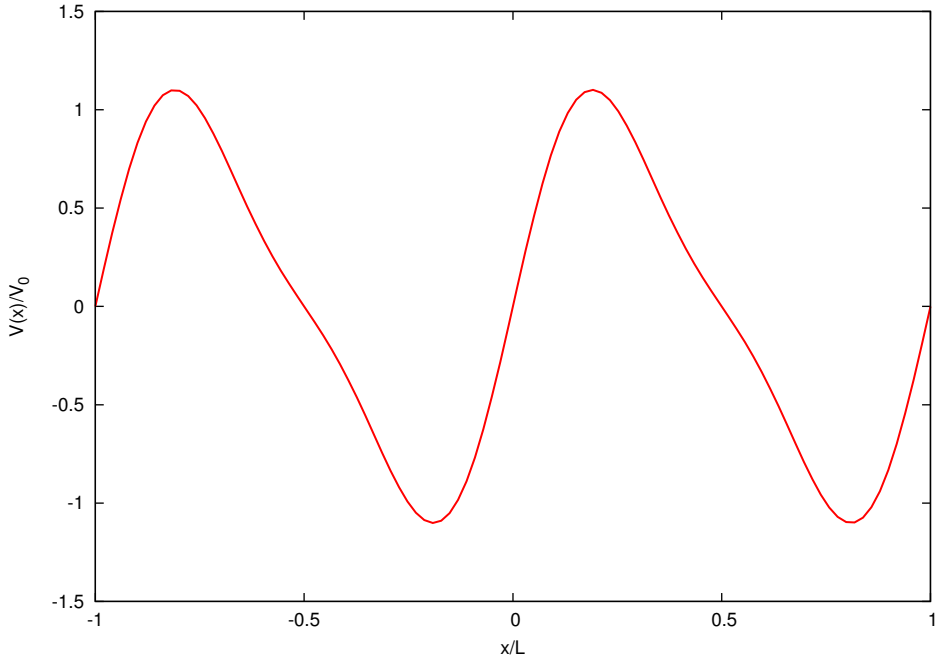


Figura 4.10: Potencial seno+seno en unidades adimensionales

sección, determinaremos  $P_V$  para el potencial dado por la Ec. (4.33) y los comportamientos asintóticos de su posición promedio y del desplazamiento cuadrático medio.

#### 4.4.1. $P_V$ para el potencial seno+seno

Para determinar la probabilidad de transición de un RW inmerso en un potencial de la forma dada por la Ec. (4.33), consideremos lo que ya encontramos en el capítulo anterior. De acuerdo con la Ec. (3.64c) y la Ec. (4.5), encontramos que

$$\begin{aligned} \Gamma = & \exp[-4\pi^2 D(t - t_0)] \sin[2\pi D^{1/2}(t - t_0)^{1/2} x_0] \\ & + k \exp[-16\pi^2 D(t - t_0)] \sin[4\pi D^{1/2}(t - t_0)^{1/2} x_0]. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Y la constante de normalización queda como

$$\begin{aligned} \mathcal{N}'^{-1} = & 1 + \frac{\varepsilon}{2}(t - t_0) \sin(2\pi x_0) + \frac{\varepsilon}{2}(t - t_0) k \sin(4\pi x_0) \\ & + \frac{\varepsilon}{2}(t - t_0) \exp[-4\pi^2 D(t - t_0)] \sin[2\pi D^{1/2}(t - t_0)^{1/2} x_0] \\ & + \frac{\varepsilon k}{2}(t - t_0) \exp[-16\pi^2 D(t - t_0)] \sin[4\pi D^{1/2}(t - t_0)^{1/2} x_0]. \end{aligned} \quad (4.35)$$

Notemos que por la periodicidad de la función seno, la constante de normalización toma el valor de la unidad para los siguientes valores de la posición inicial  $x_0 = n/2$  con  $n$  un número entero. La figura 4.11 muestra los valores que toma la constante de normalización como función de la posición inicial y del tiempo.

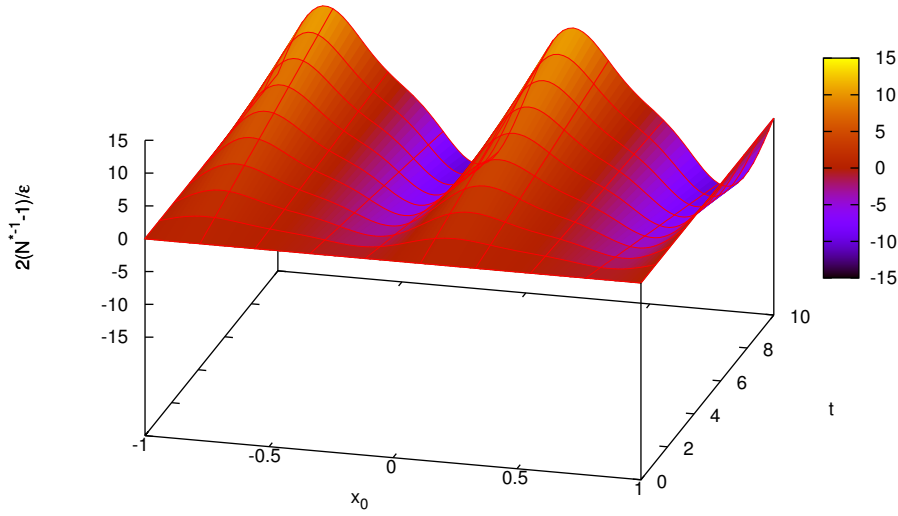


Figura 4.11: Valores de la constante de normalización para el potencial seno+seno en unidades adimensionales como función de la posición inicial y del tiempo considerando los parámetros  $t_0 = 0$ ,  $D = 1$ ,  $k = 1/4$  y  $\epsilon = 0.01$ .

De esta forma, la probabilidad de transición queda como

$$\begin{aligned}
 P_V = P + \frac{\epsilon(t - t_0)}{2} & \left\{ \exp[-4\pi^2 D(t - t_0)] \sin[2\pi D^{1/2}(t - t_0)^{1/2} x_0] \right. \\
 & + \sin(2\pi x) + k \exp[-16\pi^2 D(t - t_0)] \sin[4\pi D^{1/2}(t - t_0)^{1/2} x_0] \\
 & \left. + k \sin(4\pi x) \right\} \mathcal{N}' P. \tag{4.36}
 \end{aligned}$$

La figura 4.12 muestra la evolución temporal de  $P_V$  para el potencial seno+seno, considerando diferentes posiciones iniciales. Mientras que en la figura 4.13 se muestra como  $P_V$  pierde la dependencia en  $x_0$ , esto es debido al factor exponencial negativo que acompaña a la componente que

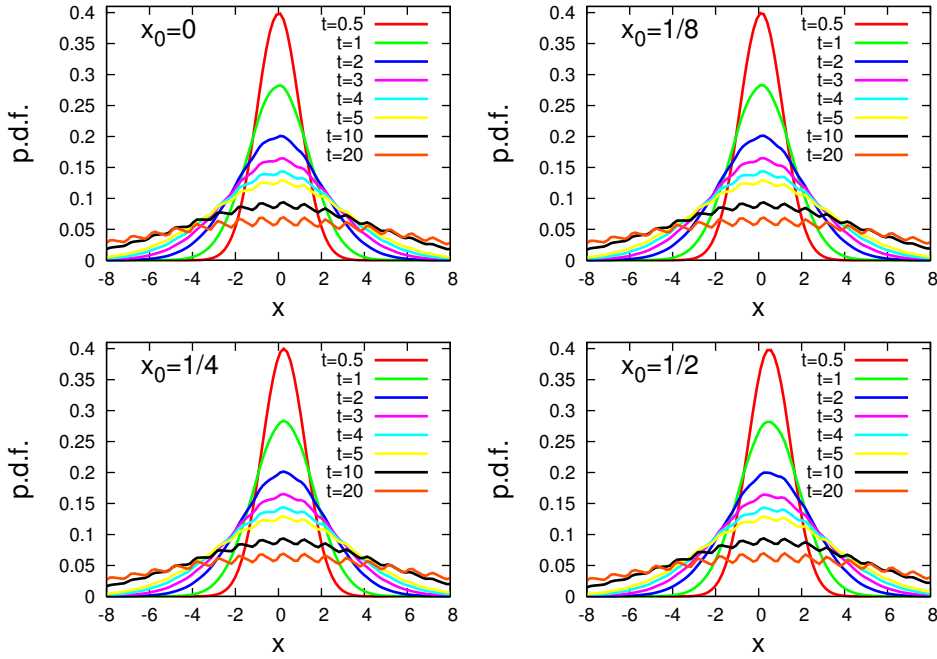


Figura 4.12: Evolución temporal de  $P_V$  para el potencial seno+seno en unidades adimensionales para diferentes posiciones iniciales e instantes de tiempo considerando los parámetros  $t_0 = 0$ ,  $D = 1$ ,  $k = 1/4$  y  $\varepsilon = 0.01$ .

contiene la información de la posición inicial. Ahora, calculemos la posición promedio y el desplazamiento cuadrático medio.

#### 4.4.2. Valores promedio y comportamientos asintóticos

La posición promedio se calcula a través de sustituir la Ec. (3.67) en la Ec. (4.14). Para simplificar las expresiones, consideremos el caso  $x_0 = 0$ . De esta forma, la posición promedio para este ejemplo es

$$E_{P_V}(X) = \varepsilon \pi D^{3/2} (t - t_0)^{5/2} \times \left\{ \exp[-4\pi^2 D(t - t_0)] + 2 \exp[-16\pi^2 D(t - t_0)] \right\} .(4.37)$$

La figura 4.14 muestra la gráfica de la posición promedio de acuerdo con la Ec. (4.37). Tal como ocurrió cuando analizamos el potencial sinusoidal,  $E_{P_V} \rightarrow 0$  conforme  $t \rightarrow \infty$ . Además, como la Ec. (3.70) no depende explícitamente de  $x_0$ , y como la fase es cero, entonces  $MSD_{P_V} = 2Dt$  para todo el procesos. Es decir, el proceso perturbado a través de un potencial seno+seno se propaga de la misma manera que un RWs.

Para entender la generación de un movimiento unidireccional a partir de las fluctuaciones fuera de equilibrio, existe una clasificación particular de sistemas *ratchet*: Los llamados “*rocking ratchet*”, los cuales contemplan el movimiento de una partícula inmersa en un potencial espacial asimétrico, sujeto a un potencial espacialmente uniforme, temporalmente periódico, determinista y de promedio cero [4.23, 4.24]. En este contexto, la partícula browniana satisface la siguiente ecuación

$$m\ddot{x} + \gamma\dot{x} + \frac{dV(x)}{dx} = F_0 \cos(\omega_D t), \quad (4.38)$$

donde  $V(x)$  básicamente es el potencial dado por un potencial seno+seno como el de la Ec. (4.33). Mientras que el término del lado derecho de la igualdad,  $F_0 \cos(\omega_D t)$ , es la fuerza de *rocking*, la cual es no conservativa, por lo que no podemos aplicar este formalismo para estudiar los sistemas *ratchet* con este tipo de fuerza de *rocking*. En cambio, si consideramos otro tipo de fuerza de *rocking*, como el caso de que sea del tipo onda cuadrada, en donde la fuerza es constante a trozos, podremos aplicar este formalismo. En el siguiente capítulo estudiaremos un modelo de *ratchet* considerando un potencial triangular y un *rocking* tipo onda cuadrada.

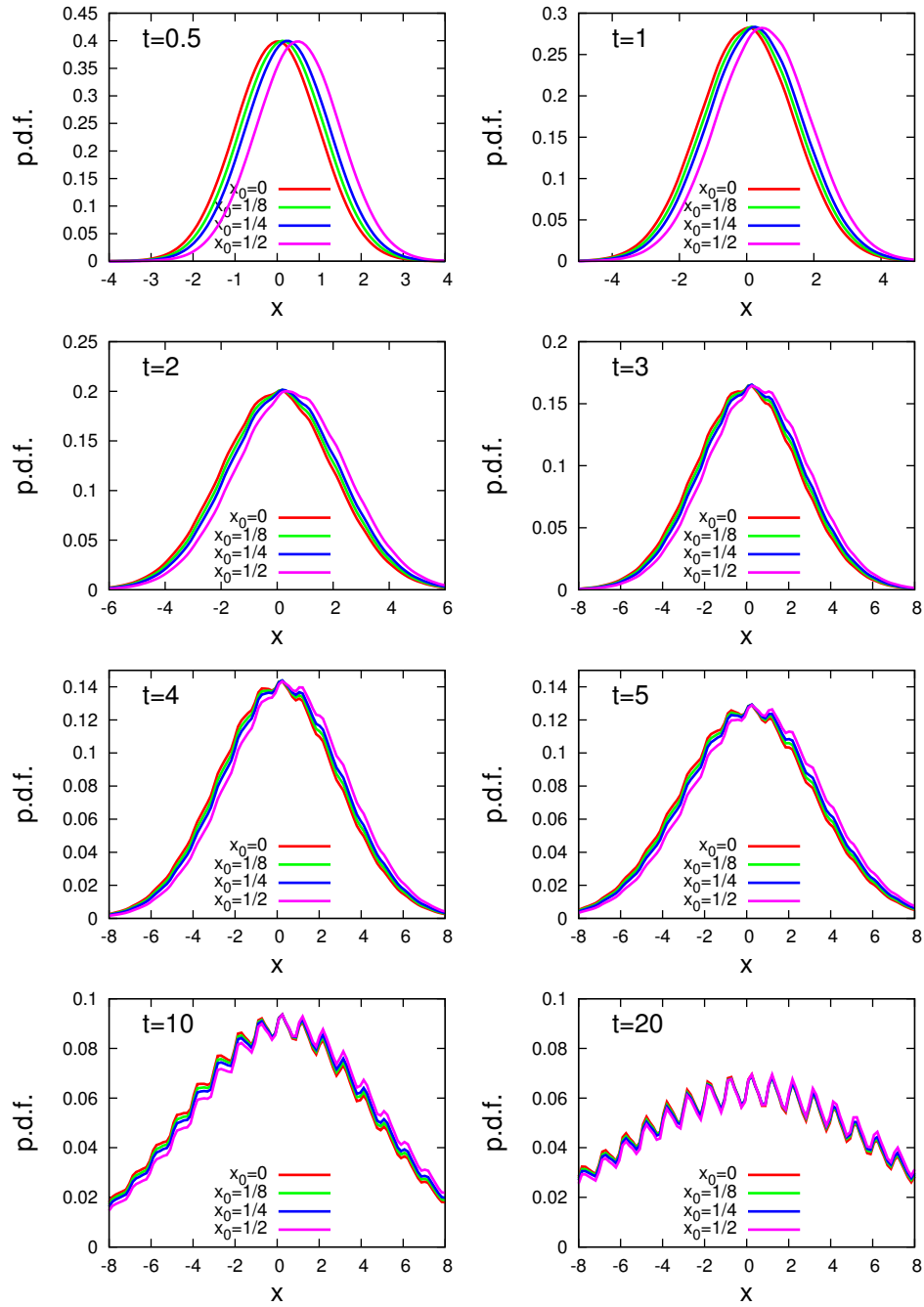


Figura 4.13: Evolución temporal de  $P_V$  para el potencial seno+seno en unidades adimensionales para diferentes posiciones iniciales e instantes de tiempo considerando los parámetros  $t_0 = 0$ ,  $D = 1$ ,  $k = 1/4$  y  $\varepsilon = 0.01$ .

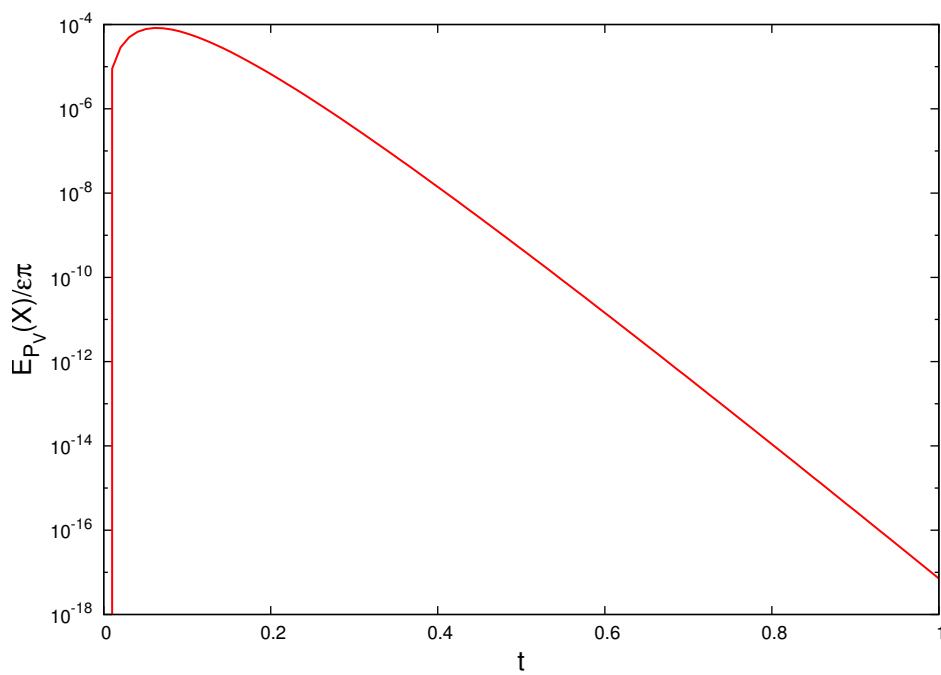


Figura 4.14: Evolución temporal de  $P_V$  para el potencial seno+seno en unidades adimensionales para diferentes posiciones iniciales e instantes de tiempo considerando los parámetros  $t_0 = 0$ ,  $D = 1$  y  $k = 1/4$ .

# Bibliografía

- [4.1] G. Drazer, H. S. Wio, and C. Tsallis, “[Anomalous diffusion with absorption: Exact time-dependent solutions](#),” *Phys. Rev. E*, vol. 61, pp. 1417–1422, Feb 2000.
- [4.2] R. Metzler and J. Klafter, “[The random walk’s guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach](#),” *Physics Reports*, vol. 339, no. 1, pp. 1 – 77, 2000.
- [4.3] R. Larson and M. Kostin, “[Friction and velocity in Kramers’ theory of chemical kinetics](#),” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 72, no. 2, pp. 1392–1400, 1980.
- [4.4] W. Coffey, M. Evans, and P. Grigolini, *Molecular Diffusion and Spectra*. A Wiley-Interscience publication, John Wiley & Sons, 1984.
- [4.5] C. Blomberg, “[The Brownian motion theory of chemical transition rates](#),” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 86, no. 1, pp. 49–66, 1977.
- [4.6] H. A. Kramers, “[Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions](#),” *Physica*, vol. 7, no. 4, pp. 284–304, 1940.
- [4.7] B. J. Matkowsky, A. Nitzan, and Z. Schuss, “[Does reaction path curvature play a role in the diffusion theory of multidimensional activated rate processes?](#),” *The Journal of chemical physics*, vol. 88, no. 8, pp. 4765–4771, 1988.
- [4.8] P. Hänggi, P. Talkner, and M. Borkovec, “[Reaction-rate theory: fifty years after Kramers](#),” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 62, pp. 251–341, 1990.
- [4.9] A. Perico, R. Pratolongo, K. F. Freed, R. W. Pastor, and A. Szabo, “[Positional time correlation function for one-dimensional systems with](#)

- barrier crossing: Memory function corrections to the optimized Rouse–Zimm approximation,” *The Journal of chemical physics*, vol. 98, no. 1, pp. 564–573, 1993.
- [4.10] A. Schenzle and H. Brand, “Multiplicative stochastic processes in statistical physics,” *Physical Review A*, vol. 20, no. 4, p. 1628, 1979.
- [4.11] L. Gammaitoni, P. Hänggi, P. Jung, and F. Marchesoni, “Stochastic resonance,” *Reviews of modern physics*, vol. 70, no. 1, p. 223, 1998.
- [4.12] I. Fedchenia, “Method of divergent series summation in the problem of particle diffusion in a bistable potential,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 25, no. 24, p. 6733, 1992.
- [4.13] W. Coffey and Y. Kalmykov, *The Langevin Equation: With Applications to Stochastic Problems in Physics, Chemistry and Electrical Engineering*. World Scientific Series in Contemporary Chemical Physics, World Scientific Publishing Company, 2012.
- [4.14] K. Lee and W. Sung, “Barrier crossing of a semiflexible ring polymer,” *Phys. Rev. E*, vol. 64, p. 041801, 2001.
- [4.15] R. Bartussek, P. Hänggi, and J. G. Kissner, “Periodically rocked thermal ratchets,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 28, no. 7, p. 459, 1994.
- [4.16] R. Bartussek, P. Reimann, and P. Hänggi, “Precise numerics versus theory for correlation ratchets,” *Physical review letters*, vol. 76, no. 7, p. 1166, 1996.
- [4.17] A. Ajdari and J. Prost, “Mouvement induit par un potentiel périodique de basse symétrie: diélectrophorese pulsée,” *Comptes rendus de l’Académie des sciences. Série 2, Mécanique, Physique, Chimie, Sciences de l’univers, Sciences de la Terre*, vol. 315, no. 13, pp. 1635–1639, 1992.
- [4.18] M. O. Magnasco, “Forced thermal ratchets,” *Physical Review Letters*, vol. 71, no. 10, p. 1477, 1993.
- [4.19] J. Luczka, R. Bartussek, and P. Hänggi, “White-noise-induced transport in periodic structures,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 31, no. 8, p. 431, 1995.

- [4.20] P. Reimann and P. Hänggi, “[Introduction to the physics of Brownian motors](#),” *Applied Physics A*, vol. 75, no. 2, pp. 169–178, 2002.
- [4.21] A. V. Arzola, K. Volke-Sepúlveda, and J. L. Mateos, “[Experimental control of transport and current reversals in a deterministic optical rocking ratchet](#),” *Physical review letters*, vol. 106, no. 16, p. 168104, 2011.
- [4.22] A. V. Arzola, K. Volke-Sepúlveda, and J. L. Mateos, “[Dynamical analysis of an optical rocking ratchet: Theory and experiment](#),” *Physical Review E*, vol. 87, no. 6, p. 062910, 2013.
- [4.23] P. Hänggi and R. Bartussek, “Nonlinear physics of complex systems (lecture notes in physics vol 476) ed j parisi, sc muller and w zimmermann,” 1996.
- [4.24] J. L. Mateos, “[Chaotic transport and current reversal in deterministic ratchets](#),” *Physical review letters*, vol. 84, no. 2, p. 258, 2000.



# Capítulo 5

## El *ratchet*

Se sabe que la miosina, kinesina y otras proteínas son conocidas como proteínas motoras, las cuales tienen la habilidad para convertir energía química derivada de la hidrólisis de ATP en trabajo mecánico. Este proceso de transducción químico-mecánica envuelve una reacción cíclica de un motor molecular con un citoesqueleto polimérico; un filamento de actina en el caso de la miosina y un microtúbulo en los casos de deína y kinesina. Para explicar este proceso molecular, es necesario determinar la fuerza producida por una molécula individual, la distancia a través de la cual el filamento es desplazado en la hidrólisis de ATP y los cocientes de transición entre los estados mecánicos y los estados bioquímicos [5.1].

Los motores moleculares son sistemas que presentan fenómenos de transporte dirigido [5.2–5.4], los cuales pueden ocurrir debido al papel constructivo del ruido en sistemas dinámicos no lineales que generan un transporte dirigido en un sistema espacialmente periódico en equilibrio térmico regido por la segunda ley de la termodinámica [5.5]. Por consiguiente, para generar este transporte, el sistema es llevado fuera del equilibrio térmico por la adición de una fuerza determinista o estocástica. El modelo para esta situación consiste en que estas fuerzas tienen características especiales: su promedio espacial y temporal son cero. Además del rompimiento del equilibrio térmico, otro requisito importante para conseguir un transporte dirigido en un sistema espacialmente periódico es la asimetría espacial de dichas fuerzas [5.6].

El comportamiento y las propiedades de transporte de una proteína motora sobre microtúbulos, en particular la kinesina, han atraído considerable atención en diferentes grupos de investigación, estos sistemas son interesantes debido a que se tienen resultados experimentales en los cuales se pueden apreciar y medir los detalles dinámicos de su movimiento [5.7, 5.8].

La kinesina es una proteína con dos cabezas que realiza caminatas en los microtúbulos dentro de las células. Debido a dichos resultados experimentales, varios autores han introducido modelos para entender el movimiento particular de la kinesina [5.9–5.16].

En términos de nuestro trabajo, este tipo de sistemas pueden ser modelados considerando que el motor molecular es una partícula browniana inmersa en un potencial periódico y asimétrico junto con una fuerza externa dependiente del tiempo de promedio cero [5.17, 5.18]. Este modelo es motivado en parte por el reto que representa explicar el transporte unidimensional de los motores moleculares en el campo de la biología [5.19]. Por simplicidad podemos considerar una fuerza de *rocking* del tipo onda cuadrada. El promedio espacial y temporal de la fuerza total externa es cero. En esta aproximación no consideraremos ningún tipo de ruido adicional. La ecuación de movimiento unidimensional de un motor molecular determinista está dada por [5.6, 5.17, 5.18, 5.32]:

$$\ddot{x} + \gamma\dot{x} - F_{Ratchet} = F_{Rocking}, \quad (5.1)$$

donde  $\gamma$  es el coeficiente de fricción,  $F_{Ratchet} + F_{Rocking}$  es la fuerza total externa actuando sobre la partícula browniana y representa individualmente la fuerza de tipo *ratchet* y el *rocking* respectivamente.

Por otra parte, en el capítulo 3 encontramos que la probabilidad de transición está dada por la Ec.(3.22b),

$$P_V = P - 0.5(t - t_0)\varepsilon\Gamma\mathcal{N}'P + 0.5(t - t_0)\varepsilon\mathcal{N}'VP \quad (5.2)$$

donde  $P$  es la probabilidad de transición de un RWs,  $\mathcal{N}'$  es la constante de normalización de  $P_V$ ,  $\Gamma$  es la integral de  $V$  con el peso estadístico  $P$  [5.33]. Con esta aproximación, es posible construir trayectorias aleatorias de un RW inmerso en el potencial  $V$ , en este caso, el potencial que es aplicado es un potencial de *ratchet* más una fuerza de *rocking*. En particular, en este capítulo consideraremos un potencial de *ratchet* triangular más una fuerza de *rocking* con forma de una onda cuadrada. Si el potencial externo es de la forma  $V(x) = \alpha x$ , y si la posición inicial es  $x_0 = 0$ , entonces la posición promedio es  $\langle x(t) \rangle = \alpha\varepsilon D(t - t_0)^2$ , además  $\sigma^2 = 2D(t - t_0)$  [5.33]. De esta forma,  $P_V$  puede interpretarse como la probabilidad de transición para un RWs con promedio en  $\alpha\varepsilon D(t - t_0)^2$  (ver Ec. (3.33)). Con esto, consideraremos un potencial de *ratchet* triangular junto con una fuerza de *rocking* tipo onda cuadrada para construir un potencial efectivo de forma lineal, para usar este último resultado, y generar trayectorias de partículas brownianas inmersas en un potencial *ratchet*.

## 5.1. Potencial de *rocking*

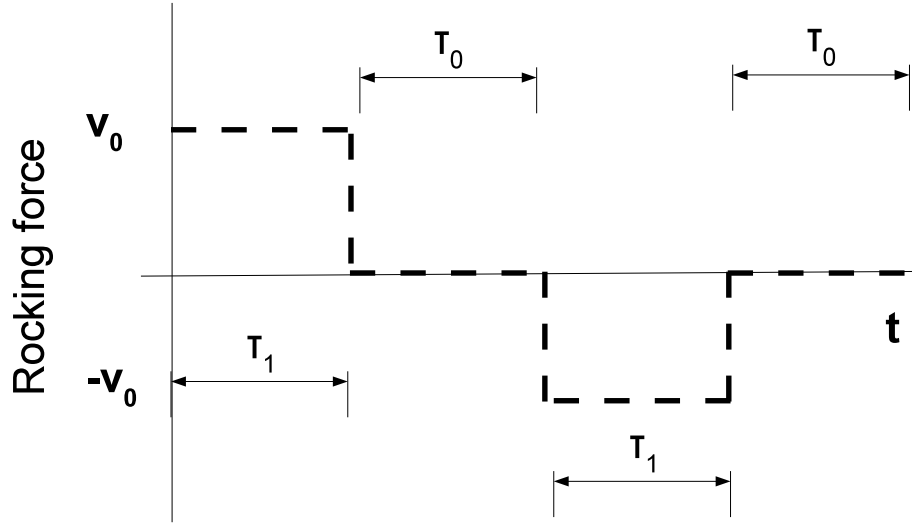


Figura 5.1: Representación del mecanismo de *rocking* en el potencial de *ratchet* donde se muestra la dependencia temporal de la fuerza de *rocking* durante el periodo  $T$ .

El mecanismo del *rocking* es introducido por medio de un movimiento de traslación periódico que actúa a lo largo el eje  $x$ . Existen varias formas de espesar esta fuerza, habitualmente se utiliza la fuerza del tipo  $F_{Rocking} = F_0 \sin(\omega t)$  (ver refs. [5.6, 5.17, 5.18, 5.32, 5.34, 5.35]). Recientemente se ha utilizado una fuerza periódica en el tiempo de la siguiente forma

$$F_{Rocking} = \begin{cases} v_0 & \text{si } 0 \leq t < \tau_1 \\ 0 & \text{si } \tau_1 \leq t < \tau_1 + \tau_0 \\ -v_0 & \text{si } \tau_1 + \tau_0 \leq t < 2\tau_1 + \tau_0 \\ 0 & \text{si } 2\tau_1 + \tau_0 \leq t < 2(\tau_1 + \tau_0), \end{cases} \quad (5.3)$$

donde la constante  $v_0$  es la amplitud,  $\tau_0$  es el tiempo de espera el cual juega un rol fundamental en la dinámica. Además, esta fuerza tiene promedio cero sobre el periodo  $T = 2(\tau_1 + \tau_0)$ , en este sentido se tiene una fuerza

que genera un transporte tipo *ratchet* no trivial [5.36, 5.37]. Un esquema del mecanismo de *rocking* se muestra en la figura 5.1. donde se muestra la fuerza externa de *rocking* como función del tiempo, donde se puede apreciar claramente su periodicidad y su carácter sin influencia [5.36]. El efecto de tener una fuerza constante a trozos, nos permite añadir un potencial lineal al potencial de *ratchet*, en donde la pendiente puede ser positiva, negativa o cero. Debido a la asimetría del potencial de *ratchet*, este mecanismo de inclinación puede inducir un transporte finito en una dirección. De esta forma, considerando esta fuerza de *rocking*, y si la fuerza del *ratchet* es conservativa, entonces podemos escribir un potencial efectivo de la siguiente forma

$$V_{eff} = V_{Ratchet} + \alpha(t)x, \quad (5.4)$$

donde  $\alpha(t)$  toma los valores  $v_0$ ,  $-v_0$  o cero de acuerdo a los valores que toma la fuerza de *rocking* de la Ec. (5.3). Mientras que el potencial de *ratchet* puede ser cualquier función periódica asimétrica.

## 5.2. Potencial de *ratchet* triangular

Un potencial que satisface las condiciones de ser periodico espacialmente, simétrico y con promedio cero es el potencial triangular dado de la siguiente forma

$$V_{Ratchet} = \begin{cases} Qx/\lambda_1 & \text{si } 0 \leq x < \lambda_1 \\ -Qx/\lambda_2 & \text{si } \lambda_1 \leq x < \lambda_1 + \lambda_2, \end{cases} \quad (5.5)$$

donde  $Q$  es la amplitud del potencial con periodo espacial  $\lambda = \lambda_1 + \lambda_2$ , mientras que la asimetría del potencial está dada a través de  $\lambda_1$  y  $\lambda_2$ , en la medida de que estos parámetros tomen valores semejantes, el potencial tomará una forma más simétrica. La figura 5.2 muestra el mecanismo de *ratchet* para un potencial triangular.

Con este mecanismo de *ratchet*, la forma del potencial efectivo es la siguiente:

$$V_{eff} = \alpha_{eff}(x, t)x, \quad (5.6)$$

donde  $\alpha_{eff} = \beta(x) + \alpha(t)$ , siendo  $\alpha(t)$  el coeficiente que toma los valores de la fuerza de *rocking*, y  $\beta(x)$  el coeficiente que toma los valores del potencial de *ratchet*. De esta forma,  $\alpha_{eff}(x, t)$  puede tomar seis posibles valores de acuerdo a su posición espacial y temporal.

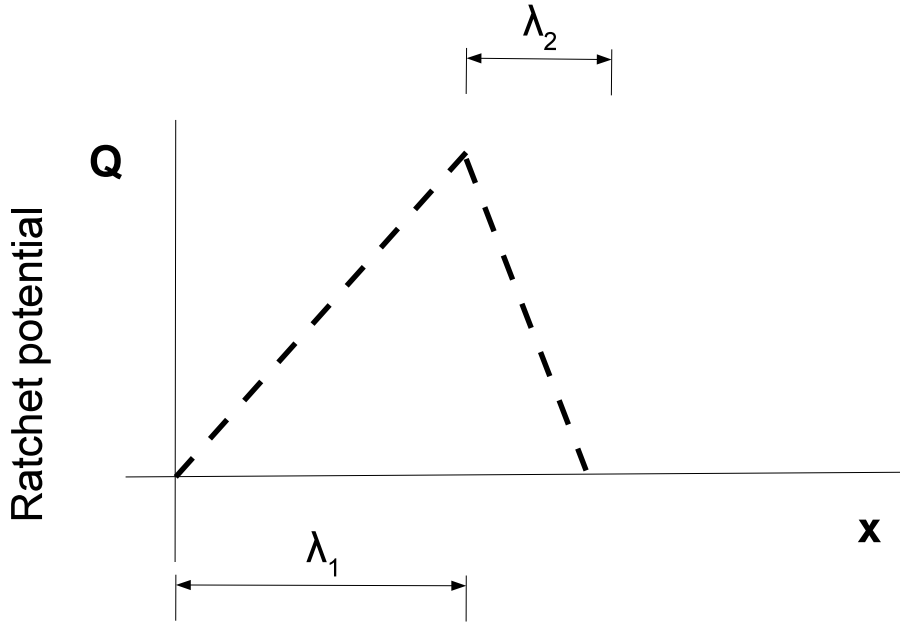


Figura 5.2: Potencial de *ratchet* triangular. La figura muestra la dependencia espacial del potencial de *ratchet* durante el periodo espacial  $\lambda$ .

De acuerdo con la Ec. (3.22b), la probabilidad de transición para el potencial efectivo es

$$P_V(x, t; 0, 0) = P(x, t; 0, 0) + \frac{\varepsilon}{2} \alpha_{eff}(x, t) x P(x, t; 0, 0), \quad (5.7)$$

y tiene la mismas propiedades que la distribución normal con valor promedio  $\mu = \alpha \varepsilon D t^2$  y varianza  $\sigma^2 = 2 D t$ , por lo tanto  $P_V \sim \mathcal{N}(\varepsilon \alpha_{eff} D t^2, 2 D t)$ , que usaremos para generar las trayectorias del *ratchet*.

### 5.3. Las trayectorias del *ratchet*

Para comenzar la construcción de las trayectorias del *ratchet* consideremos que el valor de  $\alpha_{eff}$  puede cambiar debido al sitio espacial y temporal en el que se encuentre la partícula browniana. Definimos la variable  $t_{ci}$  como el instante de tiempo al que ocurre el  $i$ -ésimo cambio del valor de  $\alpha_{eff}$  (ya sea por causa del valor de la posición o del instante de tiempo).

Por ejemplo, si pensamos que el *ratchet* se encuentra en la posición inicial  $x_0 = 0$  al instante de tiempo  $t_0 = 0$ , entonces  $t_{c1}$  ocurre cuando la posición sea mayor que  $\lambda_1$  o el tiempo sea mayor que  $\tau_1$  (lo que ocurra primero). También consideraremos  $t_{c0} = t_0$ . Denotaremos por  $x(t)$  la variable aleatoria que representa la posición del *ratchet* al instante de tiempo  $t$ . Además, definimos a  $X_i(t)$  como la variable aleatoria que genera los pasos del *ratchet* para  $t_{ci} < t$  y hasta el siguiente cambio del valor de  $\alpha_{eff}$ . La función de densidad de probabilidad para  $X_i(t)$  es una distribución normal  $\mathcal{N}(\varepsilon\alpha_{eff}D(t - t_{ci}), \sigma^2)$ , donde  $\sigma^2$  determina la medida de la dispersión del proceso de generación de cada paso. Si la generación de los pasos se da cada  $\Delta t$ , entonces  $\sigma^2 = 2D\Delta t$ . Si  $\mathcal{I}$  es la colección de índices que denotan los cambios en los valores de  $\alpha_{eff}$ , entonces la trayectoria del *ratchet* está dada a través de

$$x(t) = \sum_{i \in \mathcal{I}} X_i(t). \quad (5.8)$$

En particular, el índice cero de la variable aleatoria  $X$  denota la generación de los pasos hasta antes del primer cambio del valor de  $\alpha_{eff}$ . Por simplicidad, consideremos que la posición inicial es  $x_0 = 0$  al instante de tiempo  $t_0 = 0$ . Para poder comparar los resultados de las trayectorias generadas con nuestro modelo con las trayectorias típicas de ratchet reportadas en [5.38], consideraremos los siguientes parámetros para construir las trayectorias del *ratchet*:  $Q = 0.0347$ ,  $\lambda_1 = 0.619$ ,  $\lambda_2 = 0.381$ ,  $v_0 = 0.06$ ,  $\tau_0 = 2.334$ ,  $\tau_1 = 2.334$ ,  $\Delta t = 0.1$ . En el resto del capítulo usaremos estos valores del potencial del *ratchet* y de la fuerza de *rocking*, aunque cambiaremos los valores de la constante de difusión. En la figura 5.3 se grafica el comportamiento de una muestra de cien trayectorias con  $10^4$  pasos cada una de ellas, para los siguientes valores de la constante de difusión  $D = 1, 5, 10, 20$ . En cada gráfica en la figura 5.3 muestra una línea negra punteada, la cual representa el eje  $x(t) = 0$ , la cual se pone como referencia, ya que ésta representa la posición promedio de un RWs la cual es cero, ya que la posición inicial es  $x_0 = 0$ . Conforme el valor de la constante de difusión aumenta se observa que más trayectorias terminan por arriba de la línea punteada, lo cual es consistente con el hecho de que los sistemas *ratchets* generan el movimiento unidireccional a partir de las fluctuaciones térmicas, en este caso, de la producción de ruido a través de  $\sigma^2 = 2D\Delta t$ . A continuación, determinaremos algunas cantidades promedio que podemos calcular con la información obtenida de las trayectorias generadas con este modelo.

De manera inmediata podemos determinar la posición promedio, calcu-

lada como el promedio del ensamble de trayectorias. La figura 5.4 muestra la trayectoria promedio sobre  $10^4$  trayectorias de *ratchet* generadas con este modelo. De dicha figura se puede observar que las trayectorias generadas tienen una tendencia unidireccional, este comportamiento está en acuerdo cualitativo con los resultados reportados en la literatura [5.17, 5.36–5.40]. La figura 5.5 muestra los detalles de una fracción de la trayectorias promedio del *ratchet*. Podemos observar que todas las trayectorias promedio tienen el mismo comportamiento, cada una de ellas muestra diez crestas, lo cual es consecuencia directa de los cambios en la magnitud de la fuerza de *rocking*, el cual tiene un periodo de diez unidades de tiempo. La figura 5.6 muestra la evolución temporal de la función de densidad de probabilidad (frecuencia vs posición) de la trayectoria del *ratchet* para algunos valores de la constante de difusión. Se observa que la distribución además de tener un corrimiento unidireccional hacia la derecha, tal como ocurre con la posición promedio, también presenta un incremento en su anchura, es decir, el proceso de la trayectoria del *ratchet* presenta una difusión mayor que un RWs. Recordemos que el proceso estocástico generado por una fuerza constante se propaga de la misma forma que un RWs (ver el resultados para la desviación del MSD de la Ec. (3.39)). Estos resultados se encuentran en buen acuerdo con lo reportado por Hänggi *et al.* [5.41].

Para tener un mejor entendimiento sobre la difusión de las trayectorias del *ratchet* es necesario determinar el desplazamiento cuadrático medio, el cual es calculado a través de  $\langle x^2(t) \rangle$ . La figura 5.7 muestra el comportamiento del desplazamiento cuadrático medio para las trayectorias del *ratchet*. Se puede observar que existen dos pendiente diferentes, las cuales denotan los comportamientos asintóticos del proceso. La generalización de los procesos difusivos se caracteriza a través de la ley de potencia que gobierna el comportamiento temporal del desplazamiento cuadrático medio. Si  $x(t)$  es la trayectoria de un proceso, entonces el desplazamiento cuadrático medio está dado a través de  $\langle x^2(t) \rangle \sim t^\alpha$ , donde  $\alpha$  es el exponente de difusión anómala. Siendo que el valor de  $\alpha$  determina el tipo de difusión que gobierna el proceso. Si  $0 < \alpha < 1$ , el proceso es subdifusivo. Por el contrario, si  $\alpha > 1$ , el proceso será superdifusivo [5.42]. La tabla 5.1 muestra los resultados del ajuste para el comportamiento del desplazamiento cuadrático medio para tiempos cortos y largos. Para tiempos cortos, se observa que  $\alpha \sim 1.2$ , siendo este un proceso semejante a la difusión de un RWs. En cambio, para tiempos largos, se observa que  $\alpha \sim 2$ , siendo éste el valor típico de un proceso en régimen balístico. Éste es el resultado característico reportado por varios autores (ver refs. [5.17, 5.41, 5.43–5.47]).

Tabla 5.1: Resultados del exponente  $\alpha$  de la relación  $\langle x^2(t) \rangle \sim t^\alpha$  para los comportamientos a tiempos cortos y largos con diferentes valores de la constante de difusión.

$D$	Comportamiento a tiempos cortos	Comportamiento a tiempos largos
1.0	1.20778	1.9395
3.0	1.12603	1.99459
5.0	1.19897	1.9986
7.0	1.14825	2.01316
10.0	1.2236	1.9909
20.0	1.28997	1.99286

El modelo presentado en este capítulo nos permite tener una herramienta alternativa que no requiere de resolver ecuaciones diferenciales para la generación y el estudio teórico-computacional de los sistemas *ratchet*, el cual reproduce la descripción cualitativa de los resultados reportados en la literatura. Debemos recalcar que usamos un potencial de *ratchet* triangular caracterizado por potenciales lineales. En esta representación, cualquier potencial de *ratchet* se puede aproximar burdamente a través de una línea poligonal, donde cada segmento de ésta es un potencial lineal. Es importante recalcar que para usar el formalismo desarrollado en esta tesis es necesario considerar una fuerza de *rocking* conservativa (al menos a trozos, tal como en la Ec.(5.3)).

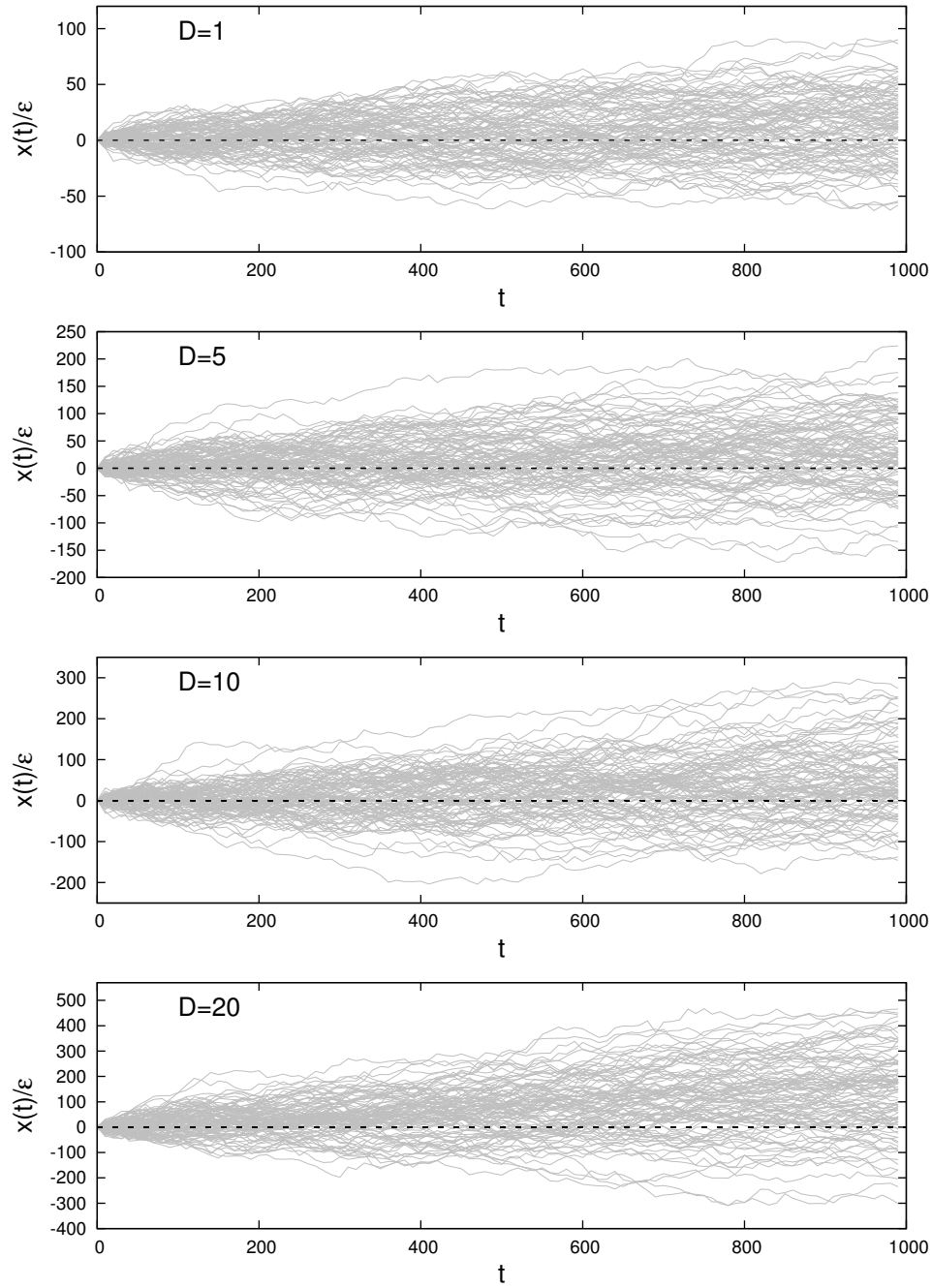


Figura 5.3: Muestra de cien trayectorias del *ratchet* para diferentes valores de la constante de difusión. Cada trayectoria se encuentra dibujada en color gris. La línea negra punteada es el eje  $x(t) = 0$ .

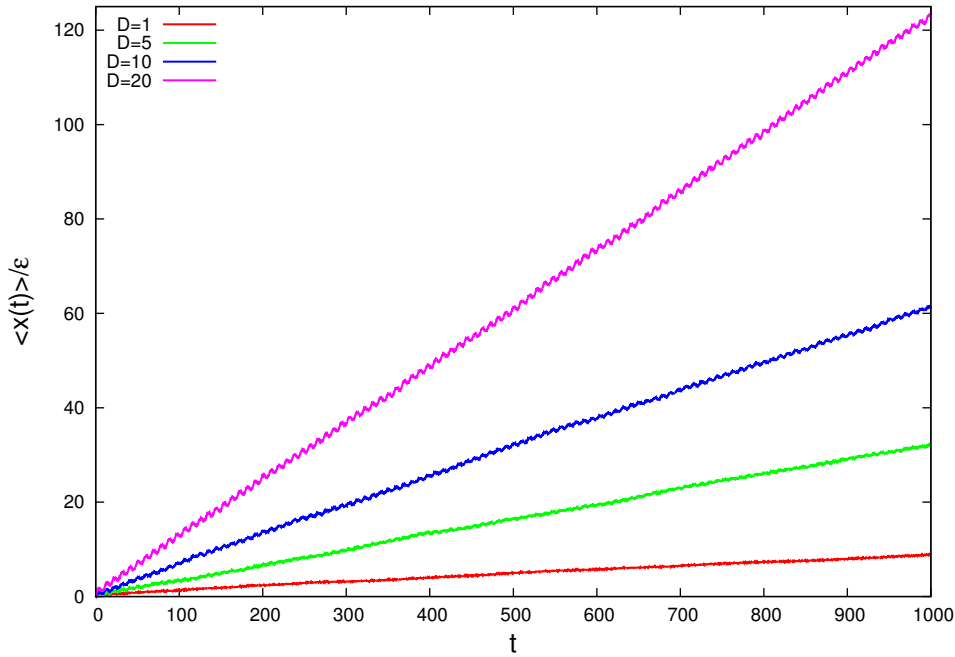


Figura 5.4: Trayectoria promedio del *ratchet* para diferentes valores de la constante de difusión.

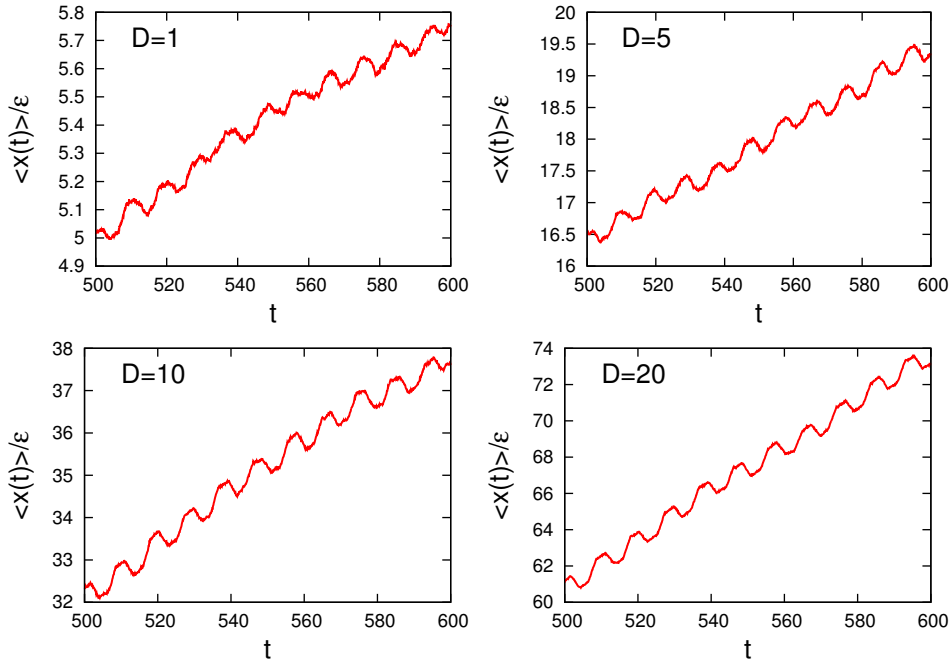


Figura 5.5: Detalles de las trayectoria promedio del *ratchet* para diferentes valores de la constante de difusión. Se muestra el comportamiento de cada una de las trayectorias promedio en la figura 5.4 en el intervalo de tiempo (500,600).

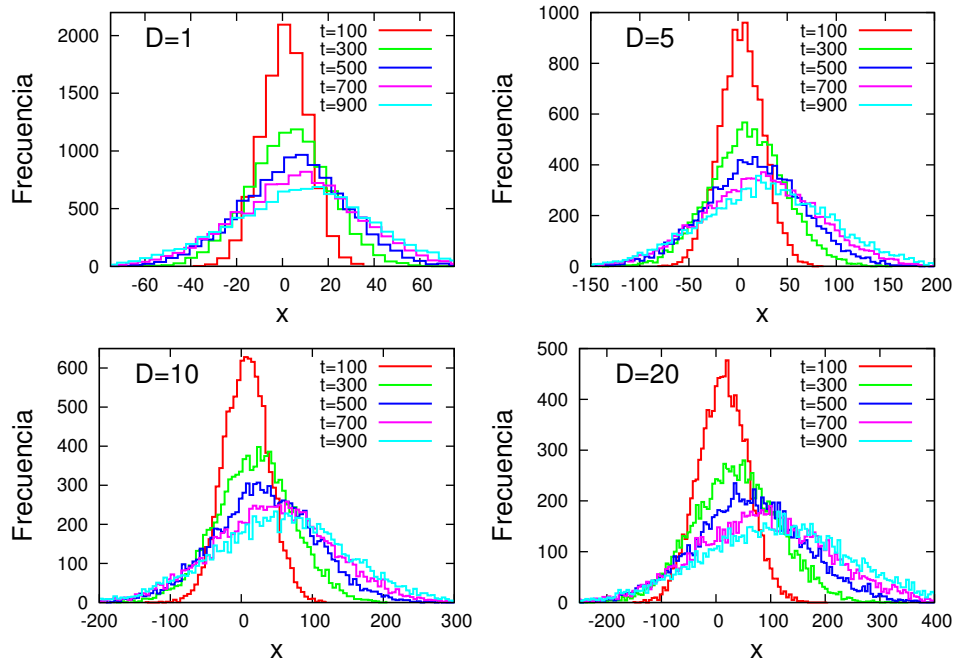


Figura 5.6: Evolución temporal de la función de densidad de probabilidad para las trayectorias del *ratchet*.

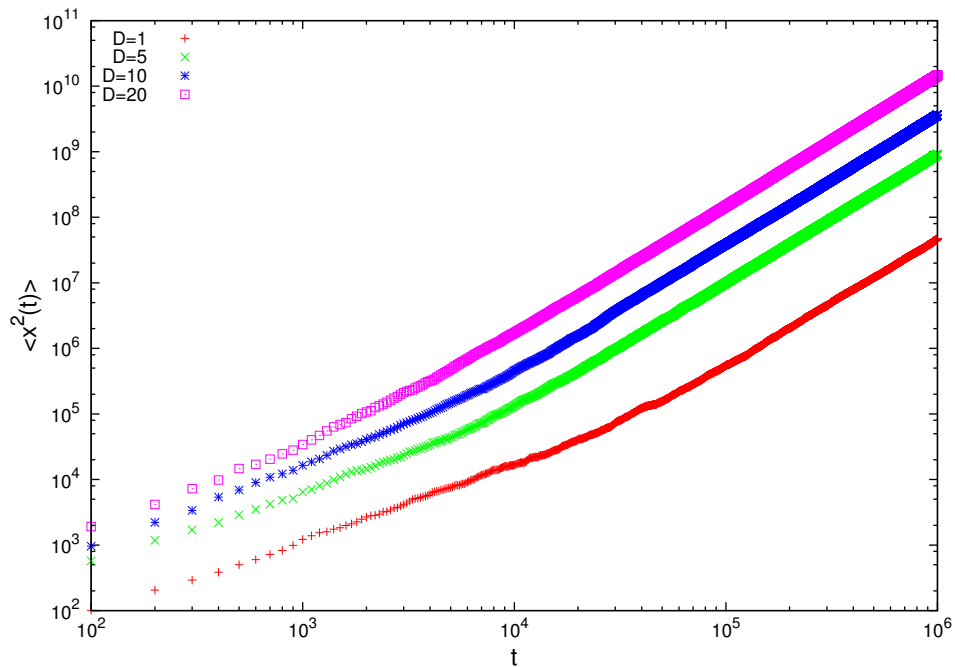


Figura 5.7: Desplazamiento cuadrático medio del proceso del proceso para la generación de trayectorias del *ratchet* con el modelo propuesto en este trabajo.



# Bibliografía

- [5.1] J. Howard, A. Hudspeth, and R. Vale, “[Movement of microtubules by single kinesin molecules.](#),” *Nature*, vol. 342, no. 6246, pp. 154–158, 1989.
- [5.2] R. D. Astumian, “[Protein conformational fluctuations and free-energy transduction](#),” *Applied Physics A*, vol. 75, no. 2, pp. 193–206, 2002.
- [5.3] P. Reimann, “[Brownian motors: noisy transport far from equilibrium](#),” *Physics reports*, vol. 361, no. 2, pp. 57–265, 2002.
- [5.4] P. Reimann and P. Hänggi, “[Introduction to the physics of Brownian motors](#),” *Applied Physics A*, vol. 75, no. 2, pp. 169–178, 2002.
- [5.5] V. S. Anishchenko, V. Astakhov, A. Neiman, T. Vadivasova, and L. Schimansky-Geier, *Nonlinear dynamics of chaotic and stochastic systems: tutorial and modern developments*. Springer Science & Business Media, 2007.
- [5.6] J. L. Mateos, “[A random walker on a ratchet](#),” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 351, no. 1, pp. 79–87, 2005.
- [5.7] R. D. Vale and R. A. Milligan, “[The way things move: looking under the hood of molecular motor proteins](#),” *Science*, vol. 288, no. 5463, pp. 88–95, 2000.
- [5.8] J. Howard *et al.*, *Mechanics of motor proteins and the cytoskeleton*. Sinauer Associates Sunderland, MA, 2001.
- [5.9] I. Derenyi and T. Vicsek, “[The kinesin walk: a dynamic model with elastically coupled heads](#),” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 93, no. 13, pp. 6775–6779, 1996.

- [5.10] G. Stratopoulos, T. Dialynas, and G. Tsironis, “[Directional Newtonian motion and reversals of molecular motors](#),” *Physics Letters A*, vol. 252, no. 3, pp. 151–156, 1999.
- [5.11] S. Klumpp, A. Mielke, and C. Wald, “[Noise-induced transport of two coupled particles](#),” *Physical review E*, vol. 63, no. 3, p. 031914, 2001.
- [5.12] C. S. Peskin, D. You, and T. C. Elston, “[Protein flexibility and the correlation ratchet](#),” *SIAM Journal on Applied Mathematics*, vol. 61, no. 3, pp. 776–791, 2000.
- [5.13] M. Bier, “[Processive motor protein as an overdamped brownian stepper](#),” *Physical review letters*, vol. 91, no. 14, p. 148104, 2003.
- [5.14] R. Kanada and K. Sasaki, “[Theoretical model for motility and processivity of two-headed molecular motors](#),” *Physical Review E*, vol. 67, no. 6, p. 061917, 2003.
- [5.15] D. Dan, A. Jayannavar, and G. I. Menon, “[A biologically inspired ratchet model of two coupled Brownian motors](#),” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 318, no. 1, pp. 40–47, 2003.
- [5.16] H.-Y. Wang and J.-D. Bao, “[The roles of ratchet in transport of two coupled particles](#),” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 337, no. 1, pp. 13–26, 2004.
- [5.17] J. L. Mateos, “[Current reversals in deterministic ratchets: points and dimers](#),” *Physica D: Nonlinear Phenomena*, vol. 168, pp. 205–219, 2002.
- [5.18] M. Kostur, P. Hänggi, P. Talkner, and J. L. Mateos, “[Anticipated synchronization in coupled inertial ratchets with time-delayed feedback: a numerical study](#),” *Physical Review E*, vol. 72, no. 3, p. 036210, 2005.
- [5.19] M. Bier, “[Brownian ratchets in physics and biology](#),” *Contemporary Physics*, vol. 38, no. 6, pp. 371–379, 1997.
- [5.20] J. Rousselet, L. Salome, A. Ajdari, and J. Prost, “[Directional motion of Brownian particles induced by a periodic asymmetric potential](#),” *Nature*, vol. 370, no. 6489, pp. 446–448, 1994.

- [5.21] M. Bier and R. D. Astumian, “[Biasing Brownian motion in different directions in a 3-state fluctuating potential and an application for the separation of small particles](#),” *Physical review letters*, vol. 76, no. 22, p. 4277, 1996.
- [5.22] I. Derényi and R. D. Astumian, “[ac separation of particles by biased Brownian motion in a two-dimensional sieve](#),” *Physical Review E*, vol. 58, no. 6, p. 7781, 1998.
- [5.23] A. Van Oudenaarden and S. G. Boxer, “[Brownian ratchets: molecular separations in lipid bilayers supported on patterned arrays](#),” *Science*, vol. 285, no. 5430, pp. 1046–1048, 1999.
- [5.24] O. Sandre, L. Gorre-Talini, A. Ajdari, J. Prost, and P. Silberzan, “[Moving droplets on asymmetrically structured surfaces](#),” *Physical Review E*, vol. 60, no. 3, p. 2964, 1999.
- [5.25] M. Bier, M. Kostur, I. Derényi, and R. D. Astumian, “[Nonlinearly coupled flows](#),” *Physical Review E*, vol. 61, no. 6, p. 7184, 2000.
- [5.26] P. Reimann, M. Grifoni, and P. Hänggi, “[Quantum ratchets](#),” *Physical review letters*, vol. 79, no. 1, p. 10, 1997.
- [5.27] H. Linke, W. Sheng, A. Löfgren, H. Xu, P. Omling, and P. Lindelof, “[A quantum dot ratchet: Experiment and theory](#),” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 44, no. 3, p. 341, 1998.
- [5.28] H. Linke, T. Humphrey, A. Löfgren, A. Sushkov, R. Newbury, R. Taylor, and P. Omling, “[Experimental tunneling ratchets](#),” *Science*, vol. 286, no. 5448, pp. 2314–2317, 1999.
- [5.29] H. Linke, W. Sheng, A. Svensson, A. Lofgren, L. Christensson, H. Xu, P. Omling, and P. Lindelof, “[Asymmetric nonlinear conductance of quantum dots with broken inversion symmetry](#),” *PHYSICAL REVIEW-SERIES B-*, vol. 61, no. 23, pp. 15914–15926, 2000.
- [5.30] I. Zapata, R. Bartussek, F. Sols, and P. Hänggi, “[Voltage rectification by a SQUID ratchet](#),” *Physical review letters*, vol. 77, no. 11, p. 2292, 1996.
- [5.31] I. Zapata, J. Łuczka, F. Sols, and P. Hänggi, “[Tunneling center as a source of voltage rectification in Josephson junctions](#),” *Physical review letters*, vol. 80, no. 4, p. 829, 1998.

- [5.32] F. R. Alatríste and J. L. Mateos, “Phase synchronization in tilted deterministic ratchets,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 372, no. 2, pp. 263–271, 2006.
- [5.33] J. E. Ramírez, J. N. Herrera, and M. I. Martínez, “Getting a stochastic process from a conservative Lagrangian: A first approach,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 448, pp. 1 – 9, 2016.
- [5.34] J. Munarriz, J. J. Mazo, and F. Falo, “Model for hand-over-hand motion of molecular motors,” *Physical Review E*, vol. 77, no. 3, p. 031915, 2008.
- [5.35] M. O. Magnasco, “Forced thermal ratchets,” *Physical Review Letters*, vol. 71, no. 10, p. 1477, 1993.
- [5.36] A. V. Arzola, K. Volke-Sepúlveda, and J. L. Mateos, “Experimental control of transport and current reversals in a deterministic optical rocking ratchet,” *Physical review letters*, vol. 106, no. 16, p. 168104, 2011.
- [5.37] A. V. Arzola, K. Volke-Sepúlveda, and J. L. Mateos, “Dynamical analysis of an optical rocking ratchet: Theory and experiment,” *Physical Review E*, vol. 87, no. 6, p. 062910, 2013.
- [5.38] R. Bartussek, P. Hänggi, and J. G. Kissner, “Periodically Rocked Thermal Ratchets,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 28, no. 7, p. 459, 1994.
- [5.39] J. L. Mateos, “Current reversals in chaotic ratchets: the battle of the attractors,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 325, no. 1, pp. 92–100, 2003.
- [5.40] K. Loutherbäck, J. Puchalla, R. H. Austin, and J. C. Sturm, “Deterministic microfluidic ratchet,” *Physical review letters*, vol. 102, no. 4, p. 045301, 2009.
- [5.41] P. Jung, J. Kissner, and P. Hänggi, “Regular and chaotic transport in asymmetric periodic potentials: Inertia ratchets,” *Physical review letters*, vol. 76, no. 18, p. 3436, 1996.
- [5.42] I. Eliazar and J. Klafter, “Ultra diffusions,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 43, no. 13, p. 132002, 2010.

- [5.43] J.-D. Bao and Y.-Z. Zhuo, “[Ballistic diffusion induced by a thermal broadband noise](#),” *Physical review letters*, vol. 91, no. 13, p. 138104, 2003.
- [5.44] J.-D. Bao, “[Anomalous transport in unbound and ratchet potentials](#),” *Phys. Rev. E*, vol. 69, p. 016124, Jan 2004.
- [5.45] D. Poletti, T. J. Alexander, E. A. Ostrovskaya, B. Li, and Y. S. Kivshar, “[Dynamics of Matter-Wave Solitons in a Ratchet Potential](#),” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 101, p. 150403, Oct 2008.
- [5.46] S. Savelév, F. Marchesoni, and F. Nori, “[Interacting particles on a rocked ratchet: Rectification by condensation](#),” *Phys. Rev. E*, vol. 71, p. 011107, Jan 2005.
- [5.47] J. L. Mateos, “[Chaotic transport and current reversal in deterministic ratchets](#),” *Physical review letters*, vol. 84, no. 2, p. 258, 2000.



# Capítulo 6

## Conclusiones

La herramienta desarrollada en este trabajo, nos provee de un método para determinar de manera analítica la probabilidad de transición de un proceso estocástico generado a través de una lagrangiana con un potencial acoplado perturbativamente, el cuál puede interpretarse como RW inmerso en un campo externo (ya sea una sola fuerza o una superposición de fuerzas). Por lo tanto, esta aproximación solo es válida siempre que se consideren potenciales  $V(x)$  débiles, lo cual es modulado a través de los valores que puede tomar la constante de acoplamiento  $\varepsilon$ .

El uso de los métodos de la integral de trayectoria nos permite establecer un vínculo entre la mecánica clásica y los procesos estocástico. Usando la propiedad de convolución de la probabilidad de transición de un RWs (Ecuación de Kolmogorov-Chapman para procesos de Markov) se demuestra que éste tiene asociada una acción de partícula libre [6.1, 6.2].

$$\underbrace{\exp \left[ -\frac{(x - x_0)^2}{4D(t - t_0)} \right]}_{\text{RWs}} \quad \longleftrightarrow \quad \underbrace{\int_0^{t_0} d\tau \frac{\dot{x}^2(\tau)}{4D}}_{\text{Partícula libre}}$$

Integral de trayectoria

Considerando este último hecho, se propuso una perturbación de la lagrangiana de una partícula libre debido a un potencial  $V(x)$  acoplada perturbativamente a través de  $\varepsilon \ll 1$  (ver Ec. (3.3)). Luego, para resolver la integral de trayectoria con la lagrangiana perturbada propusimos una discretización de la acción (ver Ec. (3.9)). Esto nos permitió escribir la función de Green como una convolución, donde los factores en las integrales fueron identificado como la probabilidad de transición de un proceso

estocástico generado por la lagrangiana de la Ec. (3.3), la cual fue denotada por  $P_V$  (ver Ec. (3.11)) y satisface una ecuación tipo Schrödinger (ver Ec. (3.14)), con la condición inicial  $P_V(\mathbf{x}, t_0; \mathbf{x}_0, t_0) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$  [6.2–6.4]. Para determinar la condición de normalización de  $P_V$ , nos fijamos en su expansión en serie. Ya que  $\varepsilon$  es la constante de acoplamiento perturbativo, entonces  $P_V$  se expresa como una serie perturbativa, en donde el término de orden cero es la probabilidad de transición para un RWs mientras que el término de primer orden contiene la información de la interacción del RWs con el potencial  $V(x)$  [6.2]. Esto último puede ser interpretado a partir de la aproximación en la Ec. (3.22b).

$$\underbrace{P_V}_{\text{RW forzado}} \quad \longleftrightarrow \quad \underbrace{\int_0^{t_0} d\tau (\mathcal{L}_0 - \varepsilon V)}_{\text{Integral de trayectoria Partícula libre+perturbación}}$$

El formalismo desarrollado en esta tesis nos permite tener una expresión analítica para estudiar/modelar el comportamiento de un RW inmerso en un campo de fuerzas externo débil a través de su función potencial  $V(x)$  acoplada perturbativamente. Por lo que podemos afirmar que el objetivo principal del trabajo de investigación ha sido cumplido satisfactoriamente.

Escribir a  $P_V$  como una serie perturbativa tiene la ventaja de que podemos usar la propiedad de linealidad de la integral para también calcular la función generadora de momentos como una serie perturbativa (ver Ec. (3.25)). Esto permite tener una relación analítica para la diferencia del momento del proceso perturbado respecto al proceso libre, lo cual es útil para estudiar los comportamientos asintóticos de éste.

Notemos que en el límite  $\varepsilon \rightarrow 0$ , de las Ecs. (3.21b), (3.22b), y (3.25), tenemos que  $\mathcal{N}' \rightarrow 1$ ,  $P_V \rightarrow P$ , y  $M_{\mathbf{x}, P_V}(\mathbf{T}) \rightarrow M_{\mathbf{x}, P}(\mathbf{T})$ . Por lo tanto, el desplazamiento cuadrático medio del proceso perturbado queda como  $MSD_{P_V} = 2dD(t - t_0)$ . En este límite, recuperamos el proceso estocástico de un RWs que se propaga en un espacio  $d$ -dimensional [6.2].

Dentro de las limitaciones de esta propuesta se encuentra la imposibilidad (por el momento) de determinar de manera analítica la dirección y magnitud del *drift* del proceso. A pesar de esto, podemos darnos idea de su dirección si nos fijamos en la diferencia de la posición promedio del proceso perturbado respecto al libre. Uno de los puntos fundamentales que debemos notar es que, por ejemplo, para el potencial lineal, la fuerza aplicada en el sistema clásico es  $\mathbf{F} = -k\hat{\mathbf{x}}$ , donde  $\hat{\mathbf{x}}$  es el vector unitario que apunta

en la dirección positiva del eje  $x$ . Pero la desviación del primer momento es  $E_{P_V}(X) - E_P(X) > 0$  para cualquier posición inicial. Esto sugiere que el *drift* de éste proceso estocástico tiene una dirección opuesta a  $\mathbf{F}$ . Para el caso del potencial del tipo oscilador armónico, la fuerza aplicada en el sistema clásico es  $\mathbf{F} = -2\kappa x \hat{\mathbf{x}}$ , la cual es una función impar en la posición. Pero la desviación del primer momento para este potencial tiene el signo opuesto a esta fuerza, siendo el mismo comportamiento que en el caso de potencial lineal. En general, para cualquier forma del potencial externo se observa el mismo comportamiento. Este hecho es generado por el signo negativo del exponente en la forma de la función de Green en la Ec. (3.5). Notemos que si el exponente tuviera el signo opuesto, la energía cinética no podría generar la probabilidad de transición de un RWs [6.2].

Es importante remarcar el hecho de que el trabajo desarrollado en esta tesis corresponde a una aproximación a primer orden. En esta misma aproximación, encontramos que la probabilidad de transición de  $P_V$  cuando  $V$  es el potencial para una superposición de fuerzas puede ser escrita convenientemente como una *combinación lineal* de las  $P_{V_i}$ . Esto debido a que es una aproximación a primer orden en  $\varepsilon$ , mientras que los términos que contienen la información de los productos  $V_i V_j$  son de segundo orden. Para contemplar los efectos de éstos términos, es necesario extender y hacer un análisis detallado de todas las correcciones a segundo orden en la expansión de la serie perturbativa.

Usando los resultados presentados en el Capítulo 3, modelamos un fenómeno fuera de equilibrio, los motores moleculares/sistemas *ratchets*. En la figura 5.4 se muestra de manera explícita la característica fundamental de los sistemas *ratchets*, el cual es generar un movimiento unidireccional a partir de las fluctuaciones térmicas. En nuestro caso, las fluctuaciones térmicas son representadas por las fluctuaciones estocásticas de la distribución normal que modela al RWs, es decir, a través de  $\sigma^2 = 2D\Delta t$ . Notemos que conforme el valor de  $D$  es más grande, el *ratchet* aumenta la pendiente de la trayectoria promedio. En una descripción cualitativa, los resultados obtenidos se encuentran en buen acuerdo con los resultados experimentales y teóricos reportados por otros autores (Por ejemplo P. Hänggi, J. L. Mateos, entre otros [6.5–6.11]). Mientras que el resultado para el desplazamiento cuadrático medio para tiempos largos, donde el resultado de exponente difusivo es  $\alpha \sim 2$ , el cual está en buen acuerdo con el valor reportado para los sistemas *rocked-ratchets* [6.6, 6.11–6.16].

El formalismo desarrollado en esta tesis, y en consecuencia la aproximación de  $P_V$  nos abre una ventana de perspectivas y trabajo a futuro que

podemos estudiar a partir de lo desarrollado en este escrito y en el artículo publicado (ver ref. [6.2]). Por ejemplo: i) Medir los errores y las desviaciones de  $P_V$  respecto a los resultados arrojados por las soluciones de la Ec. de Fokker-Planck o de la Ec. de Langevin. También, se puede considerar el cambio de signo en la constante de acoplamiento para que el drift del proceso perturbado concuerde con la dirección de la fuerza aplicada en el caso de la mecánica clásica. ii) Ampliar la información estadística que se puede obtener de  $P_V$ , tal como la curtosis y la anchura a media altura (FWHM por sus siglas en inglés). iii) En principio, a través de la teoría de Shannon se puede determinar una entropía para  $P_V$ . iv) Se puede extender la teoría para estudiar un sistema de muchas partículas interactuantes considerando su lagrangiana y haciendo una adecuada discretización de la acción, sobre todo, del potencial de interacción entre éstas. v) Es importante calcular las correcciones en órdenes superiores de la constante de acoplamiento. En segunda aproximación, por ejemplo, en un sistema con múltiples fuerzas aparecen términos de la forma  $V_i V_j$ . En el caso del potencial lineal, el siguiente término en la serie perturbativa es del tipo oscilador armónico, mientras que para el potencial cuadrático, el siguiente término es una corrección de orden cuarto, lo que produce un potencial efectivo de la forma de un potencial biestable. vi) Usando este mismo formalismo, se pueden explorar lagrangianas definidas en otras variedades (ver refs. [6.17–6.19]). Además, es posible considerar otro tipo de variables, tales como variables de Grassmann e identificar a qué tipo de procesos estocásticos corresponden. vii) Calcular la distribución del “first passages time”, ya que existen una gran variedad de problemas en fisicoquímica y biofísica en donde el cálculo del tiempo promedio requerido por una partícula para difundirse de un punto a otro es importante [6.20]. viii) En la línea de los sistemas *ratchets*, ahora se pueden implementar la probabilidad de transición para un RW inmerso en un potencial seno+seno/potencial 2-4 y una fuerza *rocking* de tipo onda cuadrada para tratar de reproducir los resultados obtenidos en las refs. [6.5–6.16, 6.21]. O en una descripción más burda, construir potenciales *ratchet* genéricos poligonales, para un manejo semejante al desarrollado en esta tesis, entre muchos otros problemas teóricos y experimentales relacionados.

# Bibliografía

- [6.1] C. Itzykson and J. Drouffe, *Statistical Field Theory: Volume 1, From Brownian Motion to Renormalization and Lattice Gauge Theory*. Cambridge Monographs on Mathematical Physics, Cambridge University Press, 1991.
- [6.2] J. E. Ramírez, J. N. Herrera, and M. I. Martínez, “Getting a stochastic process from a conservative Lagrangian: A first approach,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 448, pp. 1 – 9, 2016.
- [6.3] S. Brush, “Functional integrals and statistical physics,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 33, no. 1, p. 79, 1961.
- [6.4] M. Kac, “On distributions of certain Wiener functionals,” *T. Am. Math. Soc.*, vol. 65, no. 1, pp. 1–13, 1949.
- [6.5] R. Bartussek, P. Hänggi, and J. G. Kissner, “Periodically Rocked Thermal Ratchets,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 28, no. 7, p. 459, 1994.
- [6.6] J. L. Mateos, “Current reversals in deterministic ratchets: points and dimers,” *Physica D: Nonlinear Phenomena*, vol. 168, pp. 205–219, 2002.
- [6.7] A. V. Arzola, K. Volke-Sepúlveda, and J. L. Mateos, “Experimental control of transport and current reversals in a deterministic optical rocking ratchet,” *Physical review letters*, vol. 106, no. 16, p. 168104, 2011.
- [6.8] A. V. Arzola, K. Volke-Sepúlveda, and J. L. Mateos, “Dynamical analysis of an optical rocking ratchet: Theory and experiment,” *Physical Review E*, vol. 87, no. 6, p. 062910, 2013.

- [6.9] J. L. Mateos, “[Current reversals in chaotic ratchets: the battle of the attractors](#),” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 325, no. 1, pp. 92–100, 2003.
- [6.10] K. Loutharback, J. Puchalla, R. H. Austin, and J. C. Sturm, “[Deterministic microfluidic ratchet](#),” *Physical review letters*, vol. 102, no. 4, p. 045301, 2009.
- [6.11] P. Jung, J. Kissner, and P. Hänggi, “[Regular and chaotic transport in asymmetric periodic potentials: Inertia ratchets](#),” *Physical review letters*, vol. 76, no. 18, p. 3436, 1996.
- [6.12] J.-D. Bao and Y.-Z. Zhuo, “[Ballistic diffusion induced by a thermal broadband noise](#),” *Physical review letters*, vol. 91, no. 13, p. 138104, 2003.
- [6.13] J.-D. Bao, “[Anomalous transport in unbound and ratchet potentials](#),” *Phys. Rev. E*, vol. 69, p. 016124, Jan 2004.
- [6.14] D. Poletti, T. J. Alexander, E. A. Ostrovskaya, B. Li, and Y. S. Kivshar, “[Dynamics of Matter-Wave Solitons in a Ratchet Potential](#),” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 101, p. 150403, Oct 2008.
- [6.15] S. Savelév, F. Marchesoni, and F. Nori, “[Interacting particles on a rocked ratchet: Rectification by condensation](#),” *Phys. Rev. E*, vol. 71, p. 011107, Jan 2005.
- [6.16] J. L. Mateos, “[Chaotic transport and current reversal in deterministic ratchets](#),” *Physical review letters*, vol. 84, no. 2, p. 258, 2000.
- [6.17] P. Castro-Villarreal, “[Brownian motion meets Riemann curvature](#),” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2010, no. 08, p. P08006, 2010.
- [6.18] P. Castro-Villarreal, “[Observables for Brownian motion on manifolds](#),” *arXiv preprint arXiv:1212.4602*, 2012.
- [6.19] P. Castro-Villarreal, A. Villada-Balbuena, J. M. Méndez-Alcaraz, R. Castañeda-Priego, and S. Estrada-Jiménez, “[A Brownian dynamics algorithm for colloids in curved manifolds](#),” *The Journal of chemical physics*, vol. 140, no. 21, p. 214115, 2014.

- [6.20] A. Szabo, K. Schulten, and Z. Schulten, “[First passage time approach to diffusion controlled reactions](#),” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 72, no. 8, pp. 4350–4357, 1980.
- [6.21] N. J. L. Alamilla and I. S. Holek, “[Reconstructing the free-energy landscape associated to molecular motors processivity](#),” *Biophysical chemistry*, vol. 167, pp. 16–25, 2012.



# Apéndice A

## Solución exacta de los potenciales lineal y cuadrático

A continuación se presenta la solución exacta para  $P_V$  cuando se tiene una perturbación generada por un potencial lineal y más adelante la que corresponde para un potencial cuadrático, a través de la Ec. (3.11), además verificaremos que en el límite de  $\varepsilon \rightarrow 0$  recuperamos los resultados ya obtenidos.

### A.1. Potencial $V(x) = \kappa x$

Para este caso, definimos como  $\phi$  al argumento en la exponencial en la Ec. (3.11), de esta forma

$$\phi = -\frac{(x - x_0)^2}{4D(t - t_0)} + \frac{\varepsilon}{2}\kappa(t - t_0)(x + x_0), \quad (\text{A.1})$$

donde  $\mathcal{V}$  ha sido sustituida de la Ec. (3.28a). Completando cuadrados, encontramos que  $\phi$  puede expresarse de la siguiente forma

$$\begin{aligned} \phi = & -\frac{1}{4D(t - t_0)} \left[ x - (x_0 + \varepsilon\kappa D(t - t_0)^2) \right]^2 \\ & + \varepsilon\kappa(t - t_0)x_0 + \frac{\varepsilon^2\kappa^2 D(t - t_0)^3}{4}. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Por lo que la probabilidad de transición queda como:

$$P_V \propto \exp \left\{ -\frac{[x - (x_0 + \varepsilon\kappa D(t - t_0)^2)]^2}{4D(t - t_0)} \right\} \\ \times \exp \left[ \varepsilon\kappa(t - t_0)x_0 + \frac{1}{4}\varepsilon^2\kappa^2 D(t - t_0)^3 \right]. \quad (\text{A.3})$$

Por otra parte, la constante de proporcionalidad debe ser calculada a través de la condición de normalización, esto es:

$$1 = \mathcal{N} \int_{-\infty}^{\infty} P_V dx. \quad (\text{A.4})$$

Resolviendo la integral encontramos que

$$\mathcal{N}^{-1} = \sqrt{4\pi D(t - t_0)} \exp \left[ \varepsilon\kappa(t - t_0)x_0 + \frac{1}{4}\varepsilon^2\kappa^2 D(t - t_0)^3 \right]. \quad (\text{A.5})$$

Por lo tanto, la expresión exacta de la probabilidad de transición para este caso es

$$P_V = \frac{1}{\sqrt{4\pi D(t - t_0)}} \exp \left\{ -\frac{[x - (x_0 + \varepsilon\kappa D(t - t_0)^2)]^2}{4D(t - t_0)} \right\}. \quad (\text{A.6})$$

Esta última expresión para  $P_V$  es una distribución normal en donde la posición promedio se mueve de acuerdo a la solución de la ecuación de movimiento de una partícula inmersa en un campo de fuerzas constante.

En el límite de  $\varepsilon$  pequeñas, se tiene que  $\varepsilon^2 \ll \varepsilon$ , por lo que despreciamos los términos de segundo orden en la constante de acoplamiento. En este límite, la constante de normalización en la Ec. (A.5) se aproxima como sigue:

$$\mathcal{N}^{-1} = \sqrt{4\pi D(t - t_0)} [1 + \varepsilon\kappa(t - t_0)x_0], \quad (\text{A.7})$$

de donde identificamos directamente  $\mathcal{N}' - 1 = 1 + \varepsilon\kappa(t - t_0)x_0$ , el cual concuerda con la Ec.(3.28b). Además, la forma funcional de  $P_V$ , a primer orden en  $\varepsilon$  se expresa como

$$P_V = [4\pi D(t - t_0)]^{-1/2} \mathcal{N}' \exp \left[ -\frac{(x - x_0)^2}{4D(t - t_0)} \right] \\ \times \left[ 1 + \frac{\varepsilon}{2}\kappa(x + x_0)(t - t_0) \right]; \quad (\text{A.8})$$

$$= \mathcal{N}' P \left[ 1 + \frac{\varepsilon}{2}\kappa(x + x_0)(t - t_0) \right], \quad (\text{A.9})$$

esta última expresión puede ser escrita como  $P_V = \mathcal{N}'P[1 + \frac{\varepsilon}{2}\mathcal{V}]$ , la cual es justo la forma funcional que ya habíamos encontrado en la Ec. (3.22a).

## A.2. Potencial $V(x) = kx^2$

Procedemos de igual forma que para el potencial lineal, pero en este caso veremos que es posible escribir a  $P_V$  de forma exacta.

De igual forma que en el caso del potencial lineal, para este ejemplo es posible escribir a  $P_V$  de manera exacta.

De manera semejante que para el potencial lineal, definimos a  $\phi$  como el argumento de la exponencial en la Ec. (3.11), de esta forma

$$\phi = -\frac{(x - x_0)^2}{4D(t - t_0)} + \frac{\varepsilon}{2}\kappa(x^2 + x_0^2)(t - t_0), \quad (\text{A.10})$$

donde la funcional  $\mathcal{V}$  está dada en la Ec. (3.40a). Tras un poco de álgebra, el argumento  $\phi$  toma la siguiente forma

$$\phi = -\frac{1 - 2\varepsilon\kappa D(t - t_0)^2}{4D(t - t_0)} \left[ x - \frac{x_0}{1 - 2\varepsilon\kappa D(t - t_0)^2} \right]^2 + \phi_1, \quad (\text{A.11})$$

donde

$$\phi_1 = \frac{x_0^2}{[1 - 2\varepsilon\kappa D(t - t_0)^2]^2} - \frac{x_0^2}{4D(t - t_0)} + \frac{\varepsilon}{2}\kappa x_0^2(t - t_0). \quad (\text{A.12})$$

Con esto, la funcional  $P_V$  queda como

$$P_V \propto \exp \left\{ -\frac{1 - 2\varepsilon\kappa D(t - t_0)^2}{4D(t - t_0)} \left[ x - \frac{x_0}{1 - 2\varepsilon\kappa D(t - t_0)^2} \right]^2 + \phi_1 \right\}. \quad (\text{A.13})$$

Ahora, la condición de normalización nos obliga a que:

$$\mathcal{N}^{-1} = \exp(\phi_1) \sqrt{\frac{4\pi D(t - t_0)}{1 - 2\varepsilon\kappa D(t - t_0)^2}}. \quad (\text{A.14})$$

Notemos que esta expresión tiene un régimen de validez restringido, ya que el numerador puede tomar valores negativos. Esta expresión es válida siempre que  $(t - t_0)^2 < 1/2\varepsilon\kappa D$ . Sin embargo, si hacemos el cambio  $\varepsilon \rightarrow -\varepsilon$ , la solución exacta no tiene restricciones matemáticas, por lo que es

válida para cualquier instante de tiempo pero ese caso amplía la propuesta original. Finalmente,  $P_V$  calculada de manera exacta es

$$P_V = \sqrt{\frac{1 - 2\varepsilon\kappa D(t - t_0)^2}{4\pi D(t - t_0)}} \times \exp \left\{ -\frac{1 - 2\varepsilon\kappa D(t - t_0)^2}{4D(t - t_0)} \left[ x - \frac{x_0}{1 - 2\varepsilon\kappa D(t - t_0)^2} \right]^2 \right\}. \quad (\text{A.15})$$

Para estudiar el límite de  $\varepsilon$  pequeña, consideremos el caso  $x_0 = 0$ . Bajo esta consideración,  $\phi_1 = 0$ , mientras que la constante de normalización queda de la siguiente forma

$$\mathcal{N}^{-1} = \sqrt{4\pi D(t - t_0)} [1 + \varepsilon\kappa D(t - t_0)^2], \quad (\text{A.16})$$

de esta última expresión identificamos  $\mathcal{N}'^{-1} = 1 + \varepsilon\kappa D(t - t_0)^2$ , el cual concuerda con la expresión dada en la Ec. (3.40b) con  $x_0 = 0$ . Ahora, la probabilidad de transición queda como

$$P_V = [4\pi D(t - t_0)]^{-1/2} \mathcal{N}' \exp \left[ -\frac{(x - x_0)^2}{4D(t - t_0)} \right] \times \left[ 1 + \frac{\varepsilon}{2} \kappa x^2 (t - t_0) \right]; \quad (\text{A.17})$$

$$= \mathcal{N}' P \left[ 1 + \frac{\varepsilon}{2} \kappa x^2 (t - t_0) \right], \quad (\text{A.18})$$

esta última expresión puede ser escrita como  $P_V = \mathcal{N}' P [1 + \frac{\varepsilon}{2} \mathcal{V}]$ , la cual es justo la forma funcional que ya habíamos encontrado en la Ec. (3.22a) con  $x_0 = 0$ .

# Apéndice B

## Solución del potencial lineal y cuadrático en $d$ -dimensiones

En esta sección presentaremos una parte de las soluciones correspondientes a los potenciales lineal y cuadrático en un espacio  $d$ -dimensional.

### B.1. Potencial lineal

Una forma de escribir un potencial lineal en un espacio  $d$ -dimensional es la siguiente:

$$V(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{x}, \quad (\text{B.1})$$

donde  $\boldsymbol{\kappa}$  es un vector constante y su  $i$ -ésima componente representa la amplitud de la fuerza aplicada en el sistema en la  $i$ -ésima dirección. De acuerdo con la Ec. (3.22b),  $P_V$  es

$$P_V = P - \frac{\varepsilon}{2}(t - t_0)\Gamma\mathcal{N}'P + \frac{\varepsilon}{2}(t - t_0)\mathcal{N}'\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{x}P, \quad (\text{B.2})$$

donde

$$\mathcal{N}'^{-1} = 1 + \varepsilon(t - t_0)\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{x}_0; \quad (\text{B.3})$$

$$\Gamma = \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{x}_0. \quad (\text{B.4})$$

Otra opción para estudiar este sistema es considerar una base ortonormal tal que uno de los vectores de dicha base concuerde con la dirección de  $\boldsymbol{\kappa}$ , el cual podemos denotar como  $\hat{\boldsymbol{\kappa}}$ , y los restantes vectores de la base

serán denotados por  $\{\hat{e}'_i\}$ , con  $i = 2, 3, \dots, d$ . En esta nueva base, analicemos el efecto de la perturbación en cualquiera de las direcciones  $\hat{e}'_i$ , entonces  $\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{x} = 0$ , así,  $P_V = P$ , esto es, no hay perturbación sobre las direcciones perpendiculares a  $\boldsymbol{\kappa}$ . En cambio, si nos fijamos en la dirección de  $\boldsymbol{\kappa}$ , entonces  $\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{x} = \kappa x_\kappa$ , así  $P_V$  corresponde a la probabilidad de transición que ya estudiamos en los capítulos anteriores. Por lo tanto, resta observar que tendremos perturbación en la dirección paralela a  $\boldsymbol{\kappa}$ . Para corroborar este hecho es necesario calcular el vector de la posición promedio.

## B.2. Potencial cuadrático

Consideremos la forma general de un potencial cuadrático en un espacio  $d$ -dimensional. Tomemos la siguiente expresión del potencial

$$V(\mathbf{x}) = \mathbf{x} \cdot \mathbb{K}\mathbf{x}, \quad (\text{B.5})$$

donde la matriz  $\mathbb{K}$  es análoga a al tensor de inercia en la descripción de las ecuaciones de movimiento para el cuerpo rígido, y sus entradas  $\mathbb{K}_{ij}$  denota la constante elástica entre la  $i$ -ésima y  $j$ -ésima dirección. Por simplicidad, condieraremos que el sistema es isotrópico en el sentido de que se difunde a la misma velocidad en cualquier dirección y que  $\mathbf{x}_0 = 0$ . Bajo estas condiciones, el factor  $\Gamma$  es

$$\Gamma = \int_{V_\infty} \mathbf{x} \cdot \mathbb{K}\mathbf{x} P d\mathbf{x}. \quad (\text{B.6})$$

Sabemos que

$$\mathbf{x} \cdot \mathbb{K}\mathbf{x} = \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^d x_i \mathbb{K}_{ij} x_j, \quad (\text{B.7})$$

de esta forma, cuando  $i \neq j$ , las integrales de esos términos son

$$\int_{V_\infty} x_i \mathbb{K}_{ij} x_j P d\mathbf{x} = 0, \quad (\text{B.8})$$

esto porque la integral sobre la variable  $x_i$  es el valor promedio de la distribución normal en esa componente, el cual es cero. De esta forma, encontramos que

$$\Gamma = \sum_{i=1}^d \int_{V_\infty} \mathbb{K}_{ii} x_i^2 d\mathbf{x} = 2D(t - t_0) \text{Tr}\mathbb{K}, \quad (\text{B.9})$$

donde  $\text{Tr}$  es el operador traza de una matriz. Entonces, la constante de normalización queda como

$$\mathcal{N}'^{-1} = 1 + \varepsilon D(t - t_0)^2 \text{Tr} \mathbb{K}. \quad (\text{B.10})$$

Finalmente,  $P_V$  queda como

$$P_V = P - \varepsilon D(t - t_0)^2 \text{Tr} \mathbb{K} \mathcal{N}' P + \frac{\varepsilon}{2} \mathbf{x} \cdot \mathbb{K} \mathbf{x} (t - t_0) \mathcal{N}' P. \quad (\text{B.11})$$

Esta última expresión se reduce a la Ec. (3.41) cuando  $d = 1$ .



# Apéndice C

## Enfoque hamiltoniano

En el contexto de la integral de trayectoria en la mecánica cuántica, los elementos de la matriz  $-S$  son calculados como una integral de trayectoria en el espacio fase

$$\langle q'' | U(t'', t') | q' \rangle = \int \mathcal{D}p(t) \mathcal{D}q(t) \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} S(p, q) \right], \quad (\text{C.1})$$

donde  $U$  es el operador de evolución temporal. En esta representación, la acción euclideana clásica  $S$  es imaginaria en el tiempo y es escrita en el contexto del formalismo hamiltoniano:

$$S = \int_{t'}^{t''} dt [-ip(t)\dot{q}(t) + H(p(t), q(t), t)]. \quad (\text{C.2})$$

Consideremos un sistema con hamiltoniana

$$H = T + V = \frac{p^2}{2m} + V(q), \quad (\text{C.3})$$

de esta forma, la acción clásica queda como

$$S = \int_{t'}^{t''} dt \left[ -ip\dot{q} + \frac{p^2}{2m} + V(q) \right]. \quad (\text{C.4})$$

Haciendo el cambio de variable  $p = im\dot{q} + r$ , la acción expresada en la ecuación anterior toma la siguiente forma

$$S = \int_{t'}^{t''} dt \left[ \frac{r^2}{2m} + \frac{1}{2}m\dot{q}^2 + V(q) \right]. \quad (\text{C.5})$$

De esta forma, la integral de trayectoria puede factorizarse en una integral sobre  $r$

$$\mathcal{N} = \int \mathcal{D}r \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_{t'}^{t''} dt \frac{r^2}{2m} \right], \quad (\text{C.6})$$

la cual no depende del potencial  $V(q)$  y solo produce un factor de normalización que es función de  $t'$  y  $t''$ . Finalmente, los elementos de la matriz- $S$  quedan como

$$\langle q'' | U(t'', t') | q' \rangle = \mathcal{N} \int \mathcal{D}q(t) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_{t'}^{t''} dt \left[ \frac{1}{2} m \dot{q}^2 + V(q) \right] \right\}. \quad (\text{C.7})$$

Salvo el factor  $1/\hbar$ , si hacemos el cambio  $\varepsilon \rightarrow -\varepsilon$  en la integral de trayectoria en la Ec. (3.5) obtenemos la misma forma funcional de la integral de trayectoria en la Ec. (C.7). Este resultado abre la posibilidad de un planteamiento equivalente al nuestro que no requiere hacer el acuerdo de signo para el arrastre.



# Getting a stochastic process from a conservative Lagrangian: A first approach



J.E. Ramírez, J.N. Herrera\*, M.I. Martínez

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla,  
Apartado Postal 165, 72000 Puebla, Pue., Mexico

## HIGHLIGHTS

- A stochastic process is generated through the path integral with a classical action.
- The transition probability per step is expressed as a perturbation series.
- Moment-generating function is expressed as a perturbation series.

## ARTICLE INFO

### Article history:

Received 27 May 2015

Received in revised form 14 December 2015

Available online 29 December 2015

### Keywords:

Stochastic processes

Random walks

Classical Lagrangian

Path integral

## ABSTRACT

The transition probability  $P_V$  for a stochastic process generated by a conservative Lagrangian  $\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 - \varepsilon V$  is obtained at first order from a perturbation series found using a path integral. This  $P_V$  corresponds to the transition probability for a random walk with a probability density given by the sum of a normal distribution and a perturbation which may be understood as the contribution of the interaction of the random walk with the external field. It is also found that the moment-generating function for  $P_V$  can be expressed as the generating function of a normal distribution modified by a perturbation. Applications of these results to a linear potential, a harmonic oscillator potential, and an exponentially decaying potential are shown.

© 2015 Elsevier B.V. All rights reserved.

## 1. Introduction

In 1827, the Scottish botanist Robert Brown discovered under his microscope an irregular and vigorous movement of small particles (originally pollen) floating in water. Additionally, he observed that small mineral particles were also subjected to incessant motion, as if they were living organisms. This amazing behavior is now known as Brownian motion, after its discoverer.

The stochastic fluctuations observed in the Brownian motion of a colloidal particle suspended in a liquid medium arise from the fact that molecules in a fluid have random positions and momenta [1,2]. One way the probabilistic motion of a colloidal particle can be modeled is by direct calculations at the particle level to account for thermal fluctuations, or even using coarse-grained approximations [3–5]. The price one has to pay is the excessive computational time since the dynamics of each molecule is faster than the hydrodynamic scale times [6]. Alternatively, thermal fluctuations may be included in the Navier–Stokes equation by introducing stochastic terms in the force, as proposed by Landau and Lifshitz [7]. The basic idea for the treatment of fluctuations in hydrodynamics is that they may be generated by the addition of a stochastic stress tensor

\* Corresponding author.

E-mail address: [nherrera@cfm.buap.mx](mailto:nherrera@cfm.buap.mx) (J.N. Herrera).

to the usual viscosity stress tensor [8]. It has been shown that this model provides good enough results down to, essentially, the molecular scale [5,9–13].

Another stochastic model of Brownian motion builds the colloidal particle path from random independent jumps according to a local transition probability. In the general case, some type of classical chaotic evolution is assumed so that the transition probability is calculated as the average of all possible paths [14].

On the other hand, the path integral formalism for quantum mechanics was introduced by Feynman in 1948 [15]. It is widely used in theoretical physics since it provides an alternative approach to existing treatments and it is useful in the development of new ideas and approximations in the description of physical phenomena [16]. This formalism provides a standard quantization procedure based on the existence of a Hamiltonian or Lagrangian for the system under consideration. Since the path integral is defined by a stationary action integral, this procedure yields the classical equations of motion when  $\hbar$  tends to zero [17]. In this sense, it is possible to obtain a theory involving dissipative equations for a quantum system; in particular such theory reproduces the classical equations of Brownian motion in the appropriate limit [18,19].

On the other hand, Langevin equation has been used as a basis for the theory of Brownian motion. However, as it happens for any other phenomenological equation, Langevin equation has a limited validity range. It is then reasonable to use Langevin equations when we are interested in the long-time behavior of the system (long times compared to the relaxation time of the reservoir coupled to the system in question). In this case, a quantum level description is not needed because the effects on macroscopic particles in a viscous fluid can be explained by the classical theory [18]. In the path integral approach, the classical action corresponding to a simple random walk happens to be the action of a free particle in the classical mechanics context [16,20,21,17].

In this work, we use precisely the aforementioned fact, *i.e.*, that the action associated to a random walk under a path integral corresponds to the action of a free particle in a classical mechanics context [16,20,21,17]. We introduce a perturbation due to a conservative force generated by a potential  $V(\mathbf{x})$ . The Lagrangian for this new system is  $\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 - \epsilon V$  [17,22,23], where  $\epsilon$  is the perturbation coupling constant and  $\mathcal{L}_0$  is the Lagrangian for a free particle, *i.e.*, the kinetic energy. Then, using path integral methods, we obtain an approximation of the transition probability for a biased stochastic process. The problem is stated in a general fashion for  $d$  dimensions. The result can be applied to get a first approximation of the transition probability and of the moments for a biased random walk.

This paper is organized as follows: in Section 2 the transition probability of a stochastic process is obtained by means of a Green function for an action consisting of a free particle part plus a perturbation potential. In Section 3 the normalization constant is written as a perturbation series and determined to first order. In Section 4 the moment-generating function is calculated. In Section 5 the formalism developed in the previous sections is applied to a linear, a quadratic, and an exponentially-decaying potential. Finally we write our conclusions in Section 6.

## 2. The Green function and the path integral

In the theory of discrete time Markov chains, the Green function  $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0)$  gives the expected number of total sites visited before arriving at  $\mathbf{x}$  when starting at  $\mathbf{x}_0$ . For the Brownian motion, there exists an analogue of the Green function. If the transition probability per step is  $P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0)$ , the Green function is then defined as [24–28]:

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \int_{t_0}^{\infty} dt P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0). \quad (1)$$

If, in particular, the process corresponds to a free, simple random walk, then the transition probability is

$$P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = \frac{1}{[4D\pi(t-t_0)]^{d/2}} \exp\left[-\frac{(\mathbf{x}-\mathbf{x}_0)^2}{4D(t-t_0)}\right]. \quad (2)$$

If we consider random walks as Markov processes, we can write the transition probability, according to the Kolmogorov-Chapman equation, as a convolution [16,20,21]:

$$P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = \int_{V'} d\mathbf{x}' P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') P(\mathbf{x}', t'; \mathbf{x}_0, t_0). \quad (3)$$

Using this property for  $n$  intermediate steps, we have

$$P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = \int \left( \prod_{j=1}^{n-1} d\mathbf{x}_j \right) \left( \prod_{j=0}^{n-1} \frac{1}{[4D\pi(t_{j+1}-t_j)]^{d/2}} \right) \exp\left[-\frac{1}{4D} \sum_{j=0}^{n-1} \frac{(\mathbf{x}_{j+1}-\mathbf{x}_j)^2}{t_{j+1}-t_j}\right], \quad (4)$$

where  $\mathbf{x}_n = \mathbf{x}$  and  $t_n = t$ . For  $n \rightarrow \infty$ , the Green function takes the form of a path integral:

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \int_{t_0}^{\infty} dt \int \mathcal{D}\mathbf{x}(t) \exp\left[-\int_{t_0}^t d\tau \frac{\dot{\mathbf{x}}^2(\tau)}{4D}\right], \quad (5)$$

from which we identify the corresponding action

$$S_0 = \int_{t_0}^t d\tau \frac{\dot{\mathbf{x}}^2(\tau)}{4D} = \int_{t_0}^t d\tau \mathcal{L}_0, \quad (6)$$

where  $\mathcal{L}_0$  is the Lagrangian of a free particle with mass  $m = 1/2D$  [16,20,21,17]. In this way, the stochastic process generated by the Lagrangian for a free particle is a simple random walk. Thus, we can write the Green function as

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \int_{t_0}^{\infty} dt \int \mathcal{D}\mathbf{x}(t) \exp[-S_0]. \quad (7)$$

We now consider the Lagrangian of a free particle with mass  $m = 1/2D$  subjected to a conservative force, generated by the potential  $V(\mathbf{x}(t))$ , with a perturbation coupling  $|\varepsilon| \ll 1$ . This Lagrangian is given by

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 - \varepsilon V(\mathbf{x}(t)), \quad (8)$$

as in Refs. [17,22,23,29], while the action takes the following form:

$$S = \int_{t_0}^t d\tau \mathcal{L} = S_0 - \varepsilon \int_{t_0}^t d\tau V(\mathbf{x}(\tau)). \quad (9)$$

Introducing this into the general expression for the Green function as a path integral, we find

$$G_V(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \int_{t_0}^{\infty} dt \int \mathcal{D}\mathbf{x}(t) \exp \left[ -S_0 + \varepsilon \int_{t_0}^t d\tau V(\mathbf{x}(\tau)) \right], \quad (10)$$

where we have used the subscript  $V$  to denote the Green function for the Lagrangian in Eq. (8). Now, for  $n$  intermediate steps, at the instants of time  $t_0 < t_1 < \dots < t_n = t$ , with  $\mathbf{x}(t_j) = \mathbf{x}_j$ , we can approximate the integral inside the exponential in Eq. (10) in the following way:

$$\int_{t_0}^t d\tau V(\mathbf{x}(\tau)) \approx \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{n-1} \mathcal{V}(\mathbf{x}_{j+1}, t_{j+1}; \mathbf{x}_j, t_j), \quad (11)$$

where

$$\mathcal{V}(\mathbf{x}_{j+1}, t_{j+1}; \mathbf{x}_j, t_j) = (t_{j+1} - t_j) [V(\mathbf{x}_{j+1}) + V(\mathbf{x}_j)]. \quad (12)$$

In this way, the integral is the average of the left and right Riemann sums, and  $\mathcal{V}$  depends on its initial and final points. Thus, the path integral in Eq. (10) is

$$\begin{aligned} & \int \mathcal{D}\mathbf{x}(t) \exp \left[ -S_0 + \varepsilon \int_{t_0}^t d\tau V(\mathbf{x}(\tau)) \right] \\ & \propto \int \left( \prod_{j=1}^{n-1} d\mathbf{x}_j \right) \exp \left\{ \sum_{j=0}^{n-1} \left[ -\frac{(\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j)^2}{4D(t_{j+1} - t_j)} + \frac{\varepsilon}{2} \mathcal{V}(\mathbf{x}_{j+1}, t_{j+1}; \mathbf{x}_j, t_j) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (13)$$

Since

$$\exp \left\{ \sum_{j=0}^{n-1} \left[ -\frac{(\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j)^2}{4D(t_{j+1} - t_j)} + \frac{\varepsilon}{2} \mathcal{V}(\mathbf{x}_{j+1}, t_{j+1}; \mathbf{x}_j, t_j) \right] \right\} = \prod_{j=0}^{n-1} \exp \left[ -\frac{(\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j)^2}{4D(t_{j+1} - t_j)} + \frac{\varepsilon}{2} \mathcal{V}(\mathbf{x}_{j+1}, t_{j+1}; \mathbf{x}_j, t_j) \right], \quad (14)$$

the Green function for the process generated by the action of a free particle perturbed by the influence of a conservative external field is

$$G_V(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \propto \int_{t_0}^{\infty} dt \int \left( \prod_{j=1}^{n-1} d\mathbf{x}_j \right) \left( \prod_{j=0}^{n-1} \exp \left[ -\frac{(\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j)^2}{4D(t_{j+1} - t_j)} + \frac{\varepsilon}{2} \mathcal{V}(\mathbf{x}_{j+1}, t_{j+1}; \mathbf{x}_j, t_j) \right] \right). \quad (15)$$

For the stochastic process associated to the Lagrangian given by Eq. (8), we identify the transition probability per step  $P_V$  as

$$P_V(\mathbf{x}_{j+1}, t_{j+1}; \mathbf{x}_j, t_j) \propto \exp \left[ -\frac{(\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j)^2}{4D(t_{j+1} - t_j)} + \frac{\varepsilon}{2} \mathcal{V}(\mathbf{x}_{j+1}, t_{j+1}; \mathbf{x}_j, t_j) \right], \quad (16)$$

and, therefore

$$G_V(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \propto \int_{t_0}^{\infty} dt \int \left( \prod_{j=1}^{n-1} d\mathbf{x}_j \right) \left( \prod_{j=0}^{n-1} P_V(\mathbf{x}_{j+1}, t_{j+1}; \mathbf{x}_j, t_j) \right). \quad (17)$$

$$G_V(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \int_{t_0}^{\infty} dt \mathcal{N} P_V(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0). \quad (18)$$

The stochastic process generated by the Lagrangian in Eq. (8) is a Markov process and it satisfies the Kolmogorov–Chapman equation [17] as long as the path integral in Eq. (10) tends to zero when  $x \rightarrow \infty$  [17,30]. Here the proportionality constant  $\mathcal{N}$  depends on the normalization constant of  $\mathcal{D}\mathbf{x}(t)$ , which will be calculated to first order in the next section. Additionally,  $P_V$  satisfies the Schrödinger-type equation

$$\frac{\partial P_V}{\partial t} = D\Delta P_V - \varepsilon V(\mathbf{x})P_V,$$

with the initial condition  $P_V(\mathbf{x}, t_0; \mathbf{x}_0, t_0) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$  [17,30]. This means that the stochastic process cannot be observed in two different places simultaneously [21].

### 3. Normalization of $P_V$

We have found the transition probability per step is given by Eq. (16), however we still need to normalize it. To do this, we use the Taylor series

$$\exp\left[\frac{\varepsilon}{2}\mathcal{V}\right] = 1 + \frac{\varepsilon}{2}\mathcal{V} + \frac{1}{2!}\left(\frac{\varepsilon}{2}\right)^2\mathcal{V}^2 + \dots \quad (19)$$

to obtain the normalization condition as

$$1 = \mathcal{N} \{I_0 + I_1 + I_2 + \dots\}, \quad (20)$$

where  $I_k$  is given by

$$I_k = \frac{1}{k!}\left(\frac{\varepsilon}{2}\right)^k \int_{V_\infty} d\mathbf{x} \exp\left[-\frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^2}{4D(t - t_0)}\right] \mathcal{V}^k(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0). \quad (21)$$

In particular,  $I_0 = [4D\pi(t - t_0)]^{d/2}$  is the normalization constant for a free random walk in  $d$  dimensions [21], and

$$I_1 = \frac{\varepsilon(t - t_0)}{2} \left\{ V(\mathbf{x}_0)[4D\pi(t - t_0)]^{d/2} + \int_{V_\infty} d\mathbf{x} \exp\left[-\frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^2}{4D(t - t_0)}\right] V(\mathbf{x}) \right\}. \quad (22)$$

If the Taylor series for  $V(\mathbf{x})$  around  $\mathbf{x}_0$  exists, then

$$\int_{V_\infty} d\mathbf{x} \exp\left[-\frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^2}{4D(t - t_0)}\right] V(\mathbf{x}) = [4D\pi(t - t_0)]^{d/2} \sum_{n_1=0}^{\infty} \dots \sum_{n_d=0}^{\infty} \frac{v_{2n_1 \dots 2n_d}}{2^{n_1 + \dots + n_d}} \frac{[4D\pi(t - t_0)]^{2(n_1 + \dots + n_d)}}{n_1! \dots n_d!}, \quad (23)$$

where the coefficients are calculated with the following expression:

$$v_{2n_1 \dots 2n_d} = \frac{\partial^{2n_1}}{\partial x_1^{2n_1}} \dots \frac{\partial^{2n_d}}{\partial x_d^{2n_d}} V(\mathbf{x}) \Big|_{\mathbf{x}_0}. \quad (24)$$

We put Eqs. (23) and (24) in Eq. (22) to get an expression for  $I_1$ . With this expression and the expression for  $I_0$  given above, the normalization constant to first order in the perturbation potential is obtained as

$$\mathcal{N}^{-1} = [4D\pi(t - t_0)]^{d/2} \left\{ 1 + \frac{\varepsilon(t - t_0)}{2} V(\mathbf{x}_0) + \frac{\varepsilon(t - t_0)}{2} \Gamma \right\} \quad (25a)$$

$$= [4D\pi(t - t_0)]^{d/2} \mathcal{N}'^{-1}, \quad (25b)$$

where we have denoted by  $\Gamma$  all the sums in Eq. (23). In Eq. (25b),  $\mathcal{N}^{-1}$  has been conveniently factorized in such a way that the first factor can be used to complete the expression of the transition probability for a simple random walk in Eq. (16). The remaining factor ( $\mathcal{N}'^{-1}$ ), the sum between curly brackets in Eq. (25a), includes information about the external potential and it plays the role of a normalization constant.

If we introduce the Taylor series expansion of Eq. (19) and the definition of  $\mathcal{V}$  (given in Eq. (12)) into Eq. (16), and we add and subtract  $\varepsilon(t - t_0)\Gamma\mathcal{N}'P/2$ , the transition probability to first order in the perturbation potential becomes

$$P_V(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = \mathcal{N}'P \left[ 1 + \frac{\varepsilon}{2}\mathcal{V}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) \right] \quad (26a)$$

$$= P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) - \frac{\varepsilon(t - t_0)}{2}\Gamma\mathcal{N}'P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) + \frac{\varepsilon(t - t_0)}{2}\mathcal{N}'V(\mathbf{x})P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0). \quad (26b)$$

This last expression is already normalized and it has been written in a convenient form like a perturbation series, where the zeroth- and first-order terms correspond to a simple random walk and to the perturbation in Eq. (8), respectively.

#### 4. Moment-generating function

The moment-generating function allows us to calculate, through its derivatives, the expected values of a distribution. We now calculate the moment-generating function for  $P_V$  through the following equation:

$$M_{\mathbf{x},P_V}(\mathbf{T}) = \int_{V_\infty} d\mathbf{x} \exp(\mathbf{x} \cdot \mathbf{T}) P_V. \quad (27)$$

Using the first-order approximation for the transition probability, Eq. (26b), the moment-generating function becomes

$$M_{\mathbf{x},P_V}(\mathbf{T}) = M_{\mathbf{x},P}(\mathbf{T}) - \frac{\varepsilon(t-t_0)}{2} \Gamma \mathcal{N}' M_{\mathbf{x},P}(\mathbf{T}) + \frac{\varepsilon(t-t_0)}{2} \mathcal{N}' \int_{V_\infty} d\mathbf{x} \exp(\mathbf{x} \cdot \mathbf{T}) V(\mathbf{x}) P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0), \quad (28)$$

where  $M_{\mathbf{x},P}(\mathbf{T})$  is the moment-generating function for the transition probability given by the normal distribution function in Eq. (2). Notice that the remaining integral in the right hand side has the form of the integral in Eq. (23). Now, if the Taylor series of  $V(\mathbf{x})$  exists around  $\mathbf{x}_0 + 2D(t-t_0)\mathbf{T}$ , the moment-generating function becomes

$$M_{\mathbf{x},P_V}(\mathbf{T}) = M_{\mathbf{x},P}(\mathbf{T}) - \frac{\varepsilon(t-t_0)}{2} \Gamma \mathcal{N}' M_{\mathbf{x},P}(\mathbf{T}) + \frac{\varepsilon(t-t_0)}{2} \mathcal{N}' \mathcal{N}'' \exp[4D(t-t_0)\mathbf{T} \cdot [D(t-t_0)\mathbf{T} + \mathbf{x}_0]], \quad (29)$$

where

$$\mathcal{N}'' = \sum_{n_1=0}^{\infty} \dots \sum_{n_d=0}^{\infty} \frac{v'_{2n_1 \dots 2n_d} [4D\pi(t-t_0)]^{2(n_1+\dots+n_d)}}{2^{2n_1+\dots+2n_d} n_1! \dots n_d!}, \quad (30)$$

and the constants  $v'_{2n_1 \dots 2n_d}$  are given by

$$v'_{2n_1 \dots 2n_d} = \frac{\partial^{2n_1}}{\partial x_1^{2n_1}} \dots \frac{\partial^{2n_d}}{\partial x_d^{2n_d}} V(\mathbf{x}) \Big|_{\mathbf{x}_0 + 2D(t-t_0)\mathbf{T}}. \quad (31)$$

Thus, the moment-generating function may be written in the form of a perturbation series where the free term (which does not depend on the potential) corresponds to the generating function of a normal distribution.

#### 5. Examples

In this section we use Eq. (26b) to obtain the transition probability for three different perturbation potentials: a linear potential, a harmonic oscillator potential, and an exponentially-decaying potential. The corresponding first two moments are obtained as the derivatives of the moment-generating function given by Eq. (29). Then we will calculate the mean square displacement of the perturbed process using  $\langle [\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}_0]^2 \rangle$ , where  $\langle \mathbf{x}^2(t) \rangle$  and  $\langle \mathbf{x}(t) \rangle$  are calculated through the first and second moments of  $P_V$  [31,32], only the first-order term in  $\varepsilon$  are considered. Mean square displacement of the distributions  $P$  and  $P_V$  will be denoted by  $MSD_P$ ,  $MSD_{P_V}$ , respectively. A short ‘‘Remarks’’ section is included for each of the following examples where we make general comments about the moments and the mean square displacement of the  $P_V$  distribution.

##### 5.1. Example 1: $V(x) = \kappa x$

One of the simplest problems in classical mechanics is a particle moving in a region of linear potential, i.e., the motion of a particle subjected to a constant force.

To simplify the calculation, we consider a one-dimensional system ( $d = 1$ ). If the initial point is  $x_0$  at time  $t_0$ , then  $V(x_0) = \kappa x_0$ , and the quantities needed to determine the transition probability are

$$\mathcal{V}(x, t; x_0, t_0) = \kappa(x + x_0)(t - t_0); \quad (32a)$$

$$\mathcal{N}'^{-1} = 1 + \frac{\varepsilon \kappa x_0 (t - t_0)}{2}; \quad (32b)$$

$$\Gamma = 0. \quad (32c)$$

Putting these functions in Eq. (26b), the transition probability is

$$P_V(x, t; x_0, t_0) = P(x, t; x_0, t_0) + \frac{\varepsilon \kappa x (t - t_0)}{2 + \varepsilon \kappa x_0 (t - t_0)} P(x, t; x_0, t_0). \quad (33)$$

Furthermore, the moment-generating function is

$$M_{x,P_V}(T) = M_{x,P}(T) + \frac{\kappa \varepsilon (t - t_0)}{2 + \varepsilon \kappa x_0 (t - t_0)} \exp[4D^2(t-t_0)^2 T^2 + 4D(t-t_0)x_0 T] [x_0 + 2D(t-t_0)T]. \quad (34)$$

### 5.1.1. First moment

The first moment of the transition probability  $P_V$  is calculated as the first derivate of  $M_{x,P_V}$  [33], hence

$$E_{P_V}(X) = \left. \frac{d}{dT} M_{x,P_V}(T) \right|_{T=0}, \quad (35)$$

then, the difference between the first moment of  $P_V$  and that of the normal distribution may be written in terms of the perturbation coupling as

$$E_{P_V}(X) = E_P(X) + \frac{\kappa \varepsilon (t - t_0)}{2 + \varepsilon \kappa x_0 (t - t_0)} \frac{d}{dT} \left\{ \exp [4D^2 (t - t_0)^2 T^2 + 4D(t - t_0)x_0 T] \mathcal{N}'' \right\}_{T=0}. \quad (36)$$

Using this approximation, the first moment deviation generated by a linear perturbation potential is

$$E_{P_V}(X) - E_P(X) = \frac{2\kappa \varepsilon (1 + 2x_0^2) D (t - t_0)^2}{2 + \varepsilon \kappa x_0 (t - t_0)}. \quad (37)$$

### 5.1.2. Second moment

The second moment of  $P_V$  is calculated through the second derivate of  $M_{x,P_V}$  [33], hence

$$E_{P_V}(X^2) = \left. \frac{d^2}{dT^2} M_{x,P_V}(T) \right|_{T=0}. \quad (38)$$

Similarly to the first moment, the difference between the second moment of  $P_V$  and that of the normal distribution, in terms of the perturbation coupling, is

$$E_{P_V}(X^2) - E_P(X^2) = \frac{\kappa \varepsilon (t - t_0)}{2 + \varepsilon \kappa x_0 (t - t_0)} \frac{d^2}{dT^2} \left\{ \exp [4D^2 (t - t_0)^2 T^2 + 4D(t - t_0)x_0 T] \mathcal{N}'' \right\}_{T=0}. \quad (39)$$

Thus, the second moment deviation due to the linear perturbation potential is

$$E_{P_V}(X^2) - E_P(X^2) = \frac{8\kappa \varepsilon x_0 (3 + 2x_0^2) D^2 (t - t_0)^3}{2 + \varepsilon \kappa x_0 (t - t_0)}. \quad (40)$$

Finally, the mean square displacement deviation of  $P_V$  from  $P$  is

$$MSD_{P_V} - MSD_P = 4\kappa \varepsilon x_0 D (t - t_0)^2 \frac{4D(t - t_0)(3 + 2x_0^2) - 1 - 2x_0^2}{2 + \varepsilon \kappa x_0 (t - t_0)}. \quad (41)$$

### 5.1.3. Remarks

For a linear perturbation potential, we obtain a stochastic process that may be interpreted as the behavior of a Brownian particle subjected to an external constant force since  $E_{P_V}(X) - E_P(X) > 0$  for any initial position  $x_0$ . In particular, if  $x_0 = 0$ , we have the following simplifications: (i) The mean position is given by  $E_{P_V}(X) = \kappa \varepsilon D (t - t_0)^2$ ; (ii) The second moment and mean square displacement deviations are zero. This means that for this case,  $P_V$  preserves all features of a normal distribution function centered in  $\kappa \varepsilon D (t - t_0)^2$ . According to the classical equation of motion for a particle subject to a constant force,  $2\kappa \varepsilon D$  can be understood as the acceleration with which the average position of the perturbed process deviates from the simple random walk.

## 5.2. Example 2: $V(x) = \kappa x^2$

Another interesting potential in physics is the quadratic potential. In classical mechanics, this corresponds to the pendulum potential and, in general, a potential of the form  $V(\mathbf{x}) = \kappa \mathbf{x}^2$  is known as the harmonic oscillator potential. Like in the previous example, to simplify calculations, we consider the one-dimensional case. If the position of the particle at the time  $t_0$  is  $x_0$ , the quantities needed to determine the transition probability are:

$$\mathcal{V}(x, t; x_0, t_0) = \kappa (x^2 + x_0^2) (t - t_0); \quad (42a)$$

$$\mathcal{N}'^{-1} = 1 + \frac{\varepsilon \kappa}{2} (t - t_0) x_0^2 + 4\varepsilon \kappa \pi^2 D^2 (t - t_0)^3; \quad (42b)$$

$$\Gamma = 4\varepsilon \kappa \pi^2 D^2 (t - t_0)^3. \quad (42c)$$

Thus, the transition probability is given by

$$P_V(x, t; x_0, t_0) = P(x, t; x_0, t_0) - 4\varepsilon\kappa\pi^2 D^2(t - t_0)^3 \mathcal{N}'P(x, t; x_0, t_0) + \frac{\varepsilon\kappa x^2(t - t_0)}{2} \mathcal{N}'P(x, t; x_0, t_0). \quad (43)$$

The moment-generating function is

$$\begin{aligned} M_{x,P_V}(T) &= M_{x,P}(T) - 4\varepsilon\kappa\pi^2 D^2(t - t_0)^3 \mathcal{N}'M_{x,P}(T) \\ &\quad + \frac{\varepsilon}{2}\kappa(t - t_0)\mathcal{N}'[(x_0 + 2D(t - t_0)T)^2 + 4\pi^2 D^2(t - t_0)^2] \\ &\quad \times \exp[4D^2(t - t_0)^2 T^2 + 4D(t - t_0)x_0 T]. \end{aligned} \quad (44)$$

### 5.2.1. First moment

Now, using Eq. (36) we find that the deviation of the first moment with respect to the first moment of the normal distribution due to the quadratic perturbation potential is

$$E_{P_V}(X) - E_P(X) = \frac{2\varepsilon\kappa D(t - t_0)^2 x_0}{1 + \frac{\varepsilon}{2}(t - t_0)x_0^2 + 4\varepsilon\kappa\pi^2 D^2(t - t_0)^3} [1 - 2\pi^2 D(t - t_0) + 4\pi^2 D^2(t - t_0)^2 + x_0^2]. \quad (45)$$

### 5.2.2. Second moment

We use Eq. (39) to obtain the difference between the second moments due to the quadratic potential perturbation as

$$\begin{aligned} E_{P_V}(X^2) - E_P(X^2) &= \frac{4\varepsilon\kappa D^2(t - t_0)^3}{1 + \frac{\varepsilon}{2}(t - t_0)x_0^2 + 4\varepsilon\kappa\pi^2 D^2(t - t_0)^3} [1 - 2\pi^2 D(t - t_0) + 4\pi^2 D^2(t - t_0)^2 + 5x_0^2 \\ &\quad + 2x_0^2(4\pi^2 D^2(t - t_0)^2 + x_0^2)]. \end{aligned} \quad (46)$$

Therefore, the mean square displacement deviation is

$$\begin{aligned} MSD_{P_V} - MSD_P &= \frac{4\varepsilon\kappa D(t - t_0)^2}{1 + \frac{\varepsilon}{2}(t - t_0)x_0^2 + 4\varepsilon\kappa\pi^2 D^2(t - t_0)^3} \\ &\quad \times \{ [D(t - t_0) - x_0^2] [1 - 2\pi^2 D(t - t_0) + 4\pi^2 D^2(t - t_0)^2 + x_0^2] \\ &\quad + 4x_0^2 + 2x_0^2(4\pi^2 D^2(t - t_0)^2 + x_0^2) \}. \end{aligned} \quad (47)$$

### 5.2.3. Remarks

For simplicity, we consider  $x_0 = 0$ , therefore: (i) The average position is  $E_{P_V}(X) = 0$ ; (ii) The second moment and the mean square displacement deviations are given by

$$\frac{4\varepsilon D^2(t - t_0)^3}{1 + 4\varepsilon\kappa\pi^2 D^2(t - t_0)^3} [1 - 2\pi^2 D(t - t_0) + 4\pi^2 D^2(t - t_0)^2]. \quad (48)$$

In the limit  $(t - t_0) \rightarrow 0$ , the binomial expansion of the normalization constant at first order in  $\varepsilon$  takes the following form  $\mathcal{N}' \approx 1 - 4\varepsilon\kappa\pi^2 D^2(t - t_0)^3$ , in this way, the short-time behavior for the mean square displacement deviation is  $MSD_{P_V} - MSD_P \sim 4\varepsilon D^2(t - t_0)^3$ . In addition, in the limit  $t \rightarrow \infty$ , the long-time behavior for the mean square displacement deviation is  $MSD_{P_V} - MSD_P \sim 4\pi^2 D^2 t^2 / (1 + \pi^2)$ . We observe that the second moment and the mean square displacement deviations increase in time as  $t^2$ , i.e., the perturbed distribution will spread faster than the simple random walk.

### 5.3. Example 3: exponential decay

A possible form of an exponentially decaying potential is

$$V(x) = \lambda_1 \exp(-\lambda_2 x). \quad (49)$$

For this potential, the quantities needed to calculate the transition probability are:

$$\mathcal{V}(x, t; x_0, t_0) = \lambda_1(t - t_0) [\exp(-\lambda_2 x) + \exp(-\lambda_2 x_0)]. \quad (50)$$

In this case, given the form of the potential, it is convenient to make the normalization using Eq. (22). Thus,

$$\mathcal{N}'^{-1} = 1 + \frac{\varepsilon\lambda_1(t - t_0)}{2} \exp(-\lambda_2 x_0) + \frac{\varepsilon\lambda_1(t - t_0)}{2} M_{x,P}(-\lambda_2); \quad (51a)$$

$$\Gamma = \frac{\varepsilon\lambda_1(t - t_0)}{2} M_{x,P}(-\lambda_2). \quad (51b)$$

where  $M_{x,P}(-\lambda_2)$  is a constant with the same functional form as the generating moment function of a normal distribution evaluated in  $-\lambda_2$ . With this, transition probability for an exponential decaying potential is

$$P_V(x, t; x_0, t_0) = P(x, t; x_0, t_0) - \frac{\varepsilon\lambda_1}{2}(t - t_0)\mathcal{N}'M_{x,P}(-\lambda_2)P(x, t; x_0, t_0) + \frac{\varepsilon\lambda_1}{2}(t - t_0)\mathcal{N}'\exp(-\lambda_2x)P(x, t; x_0, t_0). \quad (52)$$

In a similar fashion we use Eq. (27) to calculate the moment-generating function

$$M_{x,P_V}(T) = M_{x,P}(T) + \frac{\varepsilon\lambda_1}{2}(t - t_0)\mathcal{N}'M_{x,P}(-\lambda_2)M_{x,P}(T) \{\exp[2D(t - t_0)\lambda_2T] - 1\}. \quad (53)$$

Then, the difference between the moments of the perturbed and free process may be written in terms of the moments of the normal distribution:

$$E_{P_V}(X^n) - E_P(X^n) = \frac{\varepsilon\lambda_1}{2}(t - t_0)\mathcal{N}'M_{x,P}(-\lambda_2) \frac{d^n}{dT^n} \left\{ M_{x,P}(T) \{\exp[2D(t - t_0)\lambda_2T] - 1\} \right\} \Big|_{T=0}. \quad (54)$$

For this example, the mean square displacement deviation is

$$MSD_{P_V} - MSD_P = \frac{2\varepsilon\lambda_1\lambda_2D(t - t_0)^2}{1 + \frac{\varepsilon\lambda_1(t-t_0)}{2}\exp(-\lambda_2x_0) + \frac{\varepsilon\lambda_1(t-t_0)}{2}M_{x,P}(-\lambda_2)} \times \left\{ M_{x,P}(-\lambda_2)D(t - t_0)\lambda_2 + [M_{x,P}(-\lambda_2) - 1]x_0 \right\}. \quad (55)$$

### 5.3.1. Remarks

It is worth emphasizing that, in this example, the difference between the moments is expressed in terms of the moments of the normal distribution. In the limit  $(t - t_0) \rightarrow 0$ , the normalization constant has a binomial expansion, to first order in  $\varepsilon$ ,

$$\mathcal{N}' \approx 1 - \varepsilon\lambda_1(t - t_0)\exp(-\lambda_2x_0) [1 + D(t - t_0)\lambda_2], \quad (56)$$

where the moment-generating function of the normal distribution evaluated in  $-\lambda_2$  has been approximated as  $M_{x,P}(-\lambda_2) \approx \exp(-\lambda_2x_0)[1 + 2D(t - t_0)]$ . In this case, the short-time behavior for the mean square displacement deviation is  $MSD_{P_V} - MSD_P \sim 2\varepsilon\lambda_1\lambda_2D(t - t_0)^2[\exp(-x_0\lambda_2) - 1]x_0$ . Note that for  $0 < x_0$ ,  $MSD_{P_V} - MSD_P < 0$ . This means that diffusion for the perturbed process is slower than for the simple random walk. Besides, in the limit  $t \rightarrow \infty$ , the long-time behavior for the mean square displacement deviation is  $MSD_{P_V} - MSD_P \sim 4\lambda_2^2D^2t^2$ . As in the example above, the mean square displacement deviation increases in time as  $t^2$ , i.e., diffusion for the perturbed process is faster than a simple random walk.

## 6. Conclusions

The use of the path integral methods allows us to exhibit a link between classical mechanics and stochastic processes. Starting with an action corresponding to the Lagrangian  $\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 - \varepsilon V$  one can obtain a stochastic process with transition probability  $P_V$  which may be written as a perturbation series in terms of the coupling constant  $\varepsilon$ . The zeroth-order term of this series may be identified as the transition probability of a simple random walk, as given by Eq. (2), while the first-order term may be interpreted as the lowest order contribution to the transition probability due to the interaction of the simple random walk with the external field. We found that the moment-generating function for  $P_V$  can also be written as a perturbation series where the zeroth-order term is the generating function for the simple random walk and the first-order term is the lowest order contribution from the interaction with the external field. From the expressions for  $P_V$  and for the normalization constant  $\mathcal{N}'$ , we found that the first two moments of the transition probability depended explicitly on  $x_0$ , since they were calculated as an approximation considering the Taylor series of  $V(\mathbf{x})$  around  $\mathbf{x}_0$ . The examples for the linear and the harmonic oscillator potentials exhibit explicitly this property. It can also be observed that the moments depend explicitly on  $(t - t_0)$ , making the differences between the moments of  $P_V$  and those of the simple random walk distribution to become larger as  $t \rightarrow \infty$ , which is to be expected since the drift will be maintained as long as the system remains subject to the external field. Note that, in particular, for the linear potential, the classical force is  $\mathbf{F} = -k\hat{\mathbf{x}}$ , but the first moment deviation is  $E_{P_V}(X) - E_P(X) > 0$  for any initial position. This suggests that the drift for this stochastic process had an opposite direction than that of  $\mathbf{F}$ . Moreover, for the harmonic oscillator potential, the Brownian particle should be confined, but the mean square displacement deviation is  $MSD_{P_V} - MSD_P \sim t^2$ . This is the same behavior as that for the linear potential, i.e., the drift has a direction opposite to that of the classical force. In general, for any external potential, the same behavior is seen. This fact is due to the negative sign of the exponent in Eq. (10). Note that, if the exponent had the opposite sign, the kinetic energy term would not generate the random walk transition probability. Finally, in the limit  $\varepsilon \rightarrow 0$ , from Eqs. (25b), (26b), and (29), we have  $\mathcal{N}' \rightarrow 1$ ,  $P_V \rightarrow P$ , and  $M_{x,P_V}(T) \rightarrow M_{x,P}(T)$ . Therefore, the mean square displacement of a perturbed process becomes  $MSD_{P_V} = 2dD(t - t_0)$ . In this limit, we recover the stochastic process of a  $d$ -dimensional simple random walk.

## Acknowledgments

We would like to thank Eric Martínez, Jorge Velázquez and Raúl Brito for the time devoted to fruitful discussions and for the invaluable observations made to this work. This work was supported by CONACyT (339193), Mexico.

## References

- [1] R. Kubo, M. Toda, N. Hashitsume, *Statistical Physics II: Nonequilibrium Statistical Mechanics*, in: Springer Series in Solid-State Sciences, Springer, Berlin, Heidelberg, 1998.
- [2] R. Kubo, The fluctuation–dissipation theorem, *Rep. Progr. Phys.* 29 (1) (1966) 255.
- [3] H. Noguchi, N. Kikuchi, G. Gompper, Particle-based mesoscale hydrodynamic techniques, *Europhys. Lett. EPL* 78 (1) (2007) 10005.
- [4] A. Donev, B.J. Alder, A.L. Garcia, Stochastic hard-sphere dynamics for hydrodynamics of nonideal fluids, *Phys. Rev. Lett.* 101 (2008) 075902.
- [5] A. Donev, J.B. Bell, A. de la Fuente, A.L. Garcia, Diffusive transport by thermal velocity fluctuations, *Phys. Rev. Lett.* 106 (2011) 204501.
- [6] S. Delong, F.B. Usabiaga, R. Delgado-Buscalioni, B.E. Griffith, A. Donev, Brownian dynamics without Green's functions, *J. Chem. Phys.* 140 (13) (2014).
- [7] L. Landau, E. Lifshitz, *Fluid Mechanics*, Pergamon Press, Oxford, 1959.
- [8] H.C. Öttinger, *Beyond Equilibrium Thermodynamics*, John Wiley & Sons, 2005.
- [9] A. Donev, J.B. Bell, A. de la Fuente, A.L. Garcia, Enhancement of diffusive transport by non-equilibrium thermal fluctuations, *J. Stat. Mech. Theory Exp.* 2011 (06) (2011) P06014.
- [10] B.Z. Shang, N.K. Voulgarakis, J.-W. Chu, Fluctuating hydrodynamics for multiscale modeling and simulation: Energy and heat transfer in molecular fluids, *J. Chem. Phys.* 137 (4) (2012).
- [11] N.K. Voulgarakis, J.-W. Chu, Bridging fluctuating hydrodynamics and molecular dynamics simulations of fluids, *J. Chem. Phys.* 130 (13) (2009) 134111.
- [12] B.Z. Shang, N.K. Voulgarakis, J.-W. Chu, Fluctuating hydrodynamics for multiscale modeling and simulation: Energy and heat transfer in molecular fluids, *J. Chem. Phys.* 137 (4) (2012) 044117.
- [13] A. Donev, A. Nonaka, Y. Sun, T. Fai, A. Garcia, J. Bell, Low mach number fluctuating hydrodynamics of diffusively mixing fluids, *Commun. Appl. Math. Comput. Sci.* 9 (1) (2014) 47–105.
- [14] J. Duda, From maximal entropy random walk to quantum thermodynamics, *J. Phys. Conf. Ser.* 361 (1) (2012) 012039.
- [15] R.P. Feynman, Space–time approach to non-relativistic quantum mechanics, *Rev. Modern Phys.* 20 (1948) 367–387.
- [16] M. Chaichian, A. Demichev, *Path Integrals in Physics: Volume II Quantum Field Theory, Statistical Physics and other Modern Applications*, Vol. 2, CRC Press, 2001.
- [17] S.G. Brush, Functional integrals and statistical physics, *Rev. Modern Phys.* 33 (1961) 79–92.
- [18] A. Caldeira, A. Leggett, Path integral approach to quantum brownian motion, *Physica A* 121 (3) (1983) 587–616.
- [19] R. Zwanzig, Nonlinear generalized Langevin equations, *J. Stat. Phys.* 9 (3) (1973) 215–220.
- [20] E. Santos, Interpretation of feynman formalism of quantum mechanics in terms of probabilities of paths, 2012. ArXiv Preprint arXiv:1210.2210.
- [21] C. Itzykson, J. Drouffe, *Statistical Field Theory, Vol. 1: From Brownian Motion to Renormalization and Lattice Gauge Theory*, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1989.
- [22] M.G. Calkin, R. Weinstock, *Lagrangian and Hamiltonian Mechanics*, World Scientific, 1996.
- [23] H. Goldstein, C. Poole Jr., *Classical Mechanics*, Addison Wesley San Francisco, 2002.
- [24] K. Konstantopoulos, Topic: Green's function, *Seminar on Brownian Motion*, 2011.
- [25] P. Kim, A. Mimica, Green function estimates for subordinate brownian motions: stable and beyond, *Trans. Amer. Math. Soc.* 366 (8) (2014) 4383–4422.
- [26] M. Sato, M. Katori, Determinantal correlations of brownian paths in the plane with nonintersection condition on their loop-erased parts, *Phys. Rev. E* 83 (2011) 041127.
- [27] C. Garban, R. Rhodes, V. Vargas, Liouville brownian motion, 2013. ArXiv Preprint arXiv:1301.2876.
- [28] H. Kleinert, Fractional quantum field theory, path integral, and stochastic differential equation for strongly interacting many-particle systems, *Europhys. Lett. EPL* 100 (1) (2012) 10001.
- [29] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, Oxford, 2002.
- [30] M. Kac, On distributions of certain Wiener functionals, *Trans. Amer. Math. Soc.* 65 (1) (1949) 1–13.
- [31] X. Michalet, Mean square displacement analysis of single-particle trajectories with localization error: Brownian motion in an isotropic medium, *Phys. Rev. E* 82 (2010) 041914.
- [32] G. Pavliotis, *Stochastic Processes and Applications*, Springer, 2014.
- [33] G. Grimmett, D. Welsh, *Probability: An Introduction*, Oxford University Press, 2014.