



Facultad de Ciencias  
Departamento de Física

## Máquinas térmicas mesoscópicas

Proyecto Teórico - Computacional

Daniel Felipe Vargas Castillo  
Código: 201914749

Profesor asesor: Dr. Gabriel Téllez  
Profesora revisora: Neelima Kelkar. Ph.D.

2 de junio de 2022

# 1. Introducción

Uno de los problemas de la física estadística que surgió a finales del siglo XIX e inicios del siglo XX fue el como modelar la aleatoriedad propia del movimiento de las partículas en medios compuestos de partículas aún más pequeñas a temperaturas superiores al cero absoluto. Este problema empezó desde el análisis cualitativo del movimiento browniano por parte de Robert Brown en 1827, pasó por la formulación teórica completa de este movimiento gracias a Einstein en 1905, llegando incluso al desarrollo de la ecuación de Langevin por parte de Paul Langevin, la cuál describe el cambio de variables macroscópicas (como la posición) en función de variables microscópicas de carácter estocástico (es decir, aleatorio) a partir de una ecuación diferencial estocástica [1, 2].

A partir del estudio de este problema surge la termodinámica estocástica, la cuál es el marco teórico que une la termodinámica junto a la dinámica estocástica [2]. Ahora, la termodinámica es la rama de la física que permite describir como son los procesos de intercambio de calor  $Q$  y trabajo  $W$  en sistemas físicos. Asimismo, la dinámica estocástica es el marco teórico que permite describir el funcionamiento de las variables estocásticas  $\xi$ . Estas se caracterizan por ser una colección continua de variables aleatorias a las que se les asocia un índice dado por el tiempo, donde una iteración de la variable estocástica  $\xi$  se conoce como proceso estocástico  $\xi(t)$  y es una función del tiempo [2].

Para la termodinámica estocástica, el factor que va a llevar a que las partículas del sistema presenten un comportamiento estocástico va a ser las fluctuaciones térmicas del sistema. Sin embargo, este fenómeno solo es apreciable en sistemas donde las escalas trabajadas sean mesoscópicas, es decir, aproximadamente del orden de micrómetros ( $10^{-6}$  m) [2]. De este marco se encuentra que las nociones de trabajo termodinámico  $W$  y calor  $Q$  van a ser influidas por las fluctuaciones térmicas. En consecuencia, los principios de la termodinámica no se cumplirán para una sola iteración de la variable estocástica, solo se cumplirán para los promedios de las variables termodinámicas sobre múltiples iteraciones [2].

Por otra parte, se puede extrapolar el concepto de máquina térmica a niveles mesoscópicos, donde los calores  $Q_h$  y  $Q_c$  que se intercambian en los reservorios de temperatura y el trabajo realizado  $W$  van a presentar variaciones en cada iteración dadas por las fluctuaciones térmicas [2].

El objetivo de este proyecto es familiarizarse con la termodinámica estocástica, con el fin de simular compu-

tacionalmente algunas propuestas teóricas recientes de máquinas térmicas mesoscópicas basadas en el ciclo de Carnot, con vistas en su implementación experimental a partir del uso de trampas ópticas [3, 4].

## 2. Estado del Arte

Como se mencionó con anterioridad, el primer objetivo es adquirir los conocimientos necesarios del marco teórico de la termodinámica estocástica para desarrollar las simulaciones. A continuación se presentan las temáticas que fueron revisadas y analizadas.

### 2.1. Estocasticidad

Para elaborar el concepto de estocasticidad, se debe empezar por la noción de variable aleatoria [2]. Una variable aleatoria  $\hat{n}$  permite abstraer la realización de eventos los cuales tienen asociado un espacio de probabilidades [2]. Dependiendo del dominio en el que se define la variable aleatoria en cuestión, esta puede ser discreta o continua. Para variables aleatorias discretas  $\hat{n}$ ,  $P[\hat{n} = i]$  indica la probabilidad de que la variable aleatoria  $\hat{n}$  tome el valor  $i$  [2]. A partir de lo anterior, se pueden definir funciones  $f(\hat{n})$  y sus valores esperados los cuales se denotan  $\langle f(\hat{n}) \rangle$  y vienen dados por

$$\langle f(\hat{n}) \rangle = \sum_i f(i)P[\hat{n} = i]. \quad (1)$$

Por otro lado, para variables aleatorias continuas  $\hat{y}$ , se define la probabilidad de que  $\hat{y}$  se encuentre en un intervalo diferencial  $dy$  como

$$P\left[\hat{y} \in \left[y - \frac{dy}{2}, y + \frac{dy}{2}\right]\right] = p(y) dy, \quad (2)$$

donde  $p(y)$  es la densidad de probabilidad asociada a  $y$  [2]. De la misma manera, se pueden crear funciones  $f(\hat{y})$  y sus valores esperados  $\langle f(\hat{y}) \rangle$  dados por

$$\langle f(\hat{y}) \rangle = \int f(y)p(y) dy. \quad (3)$$

A continuación, es conveniente establecer la función característica de una variable aleatoria continua [2]. Con este fin, se considera la función  $f(\hat{y}) = e^{i\phi\hat{y}}$  donde  $\phi \in \mathbb{R}$  y se define la función característica  $\Phi_y(\phi)$  como

$$\Phi_y(\phi) \equiv \langle e^{i\phi\hat{y}} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\phi y} p(y) dy. \quad (4)$$

La función característica se puede entender como la transformada de Fourier asociada a la densidad de probabilidad. La utilidad de esta función es que permite analizar el comportamiento de la densidad de probabilidad desde otra perspectiva completamente válida, la cuál puede interpretarse como el espacio conjugado asociado a la variable  $\phi$ . Por ejemplo, para encontrar el valor esperado de una función polinómica  $g(\hat{y})$  a partir de su función característica  $\Phi_y(\phi)$ , se tiene la siguiente expresión

$$\langle g(\hat{y}) \rangle = g\left(\frac{1}{i} \frac{d}{d\phi}\right) \Phi_y(\phi) \Big|_{\phi=0}, \quad (5)$$

donde  $g\left(\frac{1}{i} \frac{d}{d\phi}\right)$  es un operador que actúa sobre la función característica  $\Phi_y(\phi)$  [2].

Una vez se establece el concepto de variable aleatoria, es de utilidad analizar las variables aleatorias Gaussianas para el desarrollo posterior del presente proyecto. Este tipo de variables aleatorias se caracterizan por tener una densidad de probabilidad

$$p^{(G)}(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-(y-\mu)^2/2\sigma^2}, \quad (6)$$

donde  $\mu = \langle y \rangle$  es el promedio y  $\sigma^2 = \langle y^2 \rangle - \mu^2$  es la varianza [2]. Asimismo, al calcular su función característica  $\Phi_y^{(G)}(\phi)$ , esta viene dada por

$$\Phi_y^{(G)}(\phi) = e^{i\phi\mu} e^{-\sigma^2\phi^2/2}. \quad (7)$$

Ahora, para dar el siguiente paso a los procesos estocásticos, se deben analizar las variables aleatorias multicomponente. Por un lado, una variable aleatoria discreta multicomponente es una colección de variables aleatorias discretas  $\hat{n} = \{\hat{n}_1, \dots, \hat{n}_d\}$  con una probabilidad asociada dada por  $P[\hat{n} = \{a_i\}]$ , donde  $\{a_i\}$  es la colección de valores que toman los diferentes  $\hat{n}_i$  [2]. De igual modo, una variable aleatoria continua multicomponente  $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_d)$  es un vector cuyas componentes  $y_i$  son variables aleatorias continuas y a este vector  $\mathbf{y}$  se le asocia una densidad de probabilidad  $p(\mathbf{y})$  [2].

Asimismo, se pueden considerar funciones para variables aleatorias multicomponente discretas  $f(\hat{n})$  o conti-

nuas  $f(\mathbf{y})$ , donde sus valores esperados vendrían dados por

$$\langle f(\hat{n}) \rangle = \sum_{a_1, \dots, a_d} f(\hat{n} = \{a_i\}) P[\hat{n} = \{a_i\}], \quad (8)$$

$$\langle f(\mathbf{y}) \rangle = \int f(\mathbf{y}) p(\mathbf{y}) dy_1 \cdots dy_d. \quad (9)$$

Por último, la función característica  $\Phi_y(\phi)$  se generaliza para variables aleatorias multicomponente continuas de la siguiente forma

$$\Phi_y(\phi) \equiv \langle e^{i\phi \cdot \mathbf{y}} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\phi \cdot \mathbf{y}} p(\mathbf{y}) dy_1 \cdots dy_d. \quad (10)$$

Cabe aclarar que en esta generalización,  $\phi$  pasa de ser una variable real a un vector  $\phi \in \mathbb{R}^d$  y  $\phi \cdot \mathbf{y}$  denota el producto punto entre  $\phi$  y  $\mathbf{y}$  [2].

Nuevamente conviene analizar las variables aleatorias Gaussianas multicomponente, las cuales generalizan a las variables aleatorias Gaussianas. Este tipo de variables aleatorias multicomponente  $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_d)$  tienen una densidad de probabilidad  $p^{(G)}(\mathbf{y})$  definida por

$$p^{(G)}(\mathbf{y}) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2} \sqrt{\det(M)}} e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{y}-\boldsymbol{\mu})M(\mathbf{y}-\boldsymbol{\mu})}, \quad (11)$$

donde  $\boldsymbol{\mu} = \langle \hat{\mathbf{y}} \rangle$  es el promedio y  $M$  es una matriz a determinar [2]. Es en este punto que se puede apreciar la importancia de la función característica, ya que esta permite encontrar una expresión para  $M$ . Con lo anterior en mente, al calcular la función característica  $\Phi_y^{(G)}(\phi)$  se obtiene que

$$\Phi_y^{(G)}(\phi) = e^{i\phi \boldsymbol{\mu}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\phi^T M^{-1} \phi\right\}, \quad (12)$$

donde se denota  $\phi^T$  como el vector transpuesto a  $\phi$ . De lo anterior se puede apreciar que  $M^{-1}$  es la matriz de covarianza dada por  $M^{-1} = \langle (\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu})^T \rangle$  [2].

A partir del desarrollo realizado en la presente sección, ya se puede proceder a definir el concepto de proceso estocástico y el tratamiento matemático que este involucra. Un proceso estocástico  $\hat{\xi}$  es una variable aleatoria multicomponente que se caracteriza por tener infinitas componentes etiquetadas por un índice dado por el tiempo  $t$ , donde cada realización del proceso estocástico  $\xi(t)$  es una función del tiempo [2]. Tomando esto en consideración, se suele sugerir que dicha iteración se caracteriza por el camino que ha tomado la variable

estocástica  $\hat{\xi}$  [2].

Siguiendo con la estructura de la presente sección, se pueden considerar funcionales cuyo argumento sea un proceso estocástico  $f[\xi]$ , los cuales van a tomar diferentes valores para los diferentes caminos que toma el proceso estocástico  $\hat{\xi}$ . Sin embargo, cuando se busca calcular el valor esperado de un funcional  $\langle f[\xi] \rangle$ , se debería efectuar un producto infinito de múltiples integrales llamado la integral funcional de  $f[y]p[y]$  [2]. Para ello, se debe considerar el valor de  $f[y]$  de cada camino que toma el proceso estocástico  $\xi(t)$ , el cuál tiene asociado una densidad de probabilidad  $p[y]$  de ocurrir [2]. Es importante resaltar que, debido al comportamiento anterior, una gran parte de procesos estocásticos son objetos singulares de los cuáles no puede obtenerse una expresión [2]. No obstante, el funcional característico  $\Phi_\xi[\phi]$  permite determinar propiedades fundamentales de los procesos estocásticos. Este funcional se define como

$$\Phi_\xi[\phi] \equiv \left\langle \exp \left\{ i \int_{-\infty}^{\infty} \phi(t) \xi(t) dt \right\} \right\rangle, \quad (13)$$

donde  $\phi(t)$  se debe entender en este contexto como una función real suave [2]. Cabe resaltar que el valor esperado de la ecuación (13) también se debería calcular sobre todos los caminos posibles que toma el proceso estocástico  $\hat{\xi}$  [2].

Por último, un proceso estocástico de vital importancia es el Gaussiano, el cuál es la clara generalización de la variable aleatoria multicomponente Gaussiana en términos estocásticos. Para ello, como se había mencionado, se debe definir cuál es su funcional característico  $\Phi_\xi[\phi]$ . Extrapolando los resultados encontrados para la variable aleatoria multicomponente Gaussiana y asumiendo que  $\langle \xi \rangle = 0$ , el funcional característico de un proceso estocástico Gaussiano se define como

$$\Phi_\xi[\phi] = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(t_1) K(t_1, t_2) \phi(t_2) dt_1 dt_2 \right\}, \quad (14)$$

donde la matriz  $M^{-1}$  de covarianza pasa a ser el Kernel  $K(t_1, t_2)$  del proceso estocástico [2]. Si se realiza la doble derivada funcional de las ecuaciones (13) y (14) y se evalúa  $\phi(t) = 0$ , se sigue que el Kernel viene dado por la expresión

$$K(t, t') = \left\langle \hat{\xi}(t) \hat{\xi}(t') \right\rangle, \quad (15)$$

resultando en que el Kernel es una función de correlación entre dos procesos estocásticos  $\hat{\xi}(t)$  y  $\hat{\xi}(t')$  [2].

## 2.2. Ecuación de Langevin

Una vez elaborado el concepto de proceso estocástico, se va a desarrollar la noción de fuerza aleatoria térmica  $\xi$ , con vistas en obtener la ecuación de Langevin.

Consideremos una partícula browniana en un medio mesoscópico a temperaturas superiores a 0 K restringida a un espacio unidimensional. Esta partícula va a sufrir colisiones aleatorias con las partículas que componen al medio. Si consideramos un tiempo  $\Delta t$  pequeño tal que solo ocurra una colisión, es decir, un tiempo mucho menor al tiempo microscópico característico del medio  $\tau_m$ , la fuerza que va a experimentar la partícula browniana será como un pico, como se puede apreciar en la Figura 1

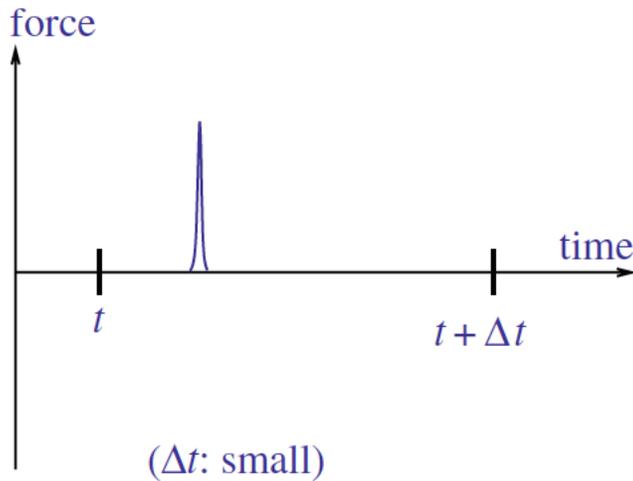


Figura 1: Esquema representativo el cuál permite entender la fuerza que va a experimentar una partícula browniana en un medio mesoscópico para un intervalo  $\Delta t \ll \tau_m$ . Tomada de [2].

Ahora, si consideramos un tiempo  $\Delta t \gg \tau_m$ , la fuerza que va a experimentar la partícula browniana estará dada por múltiples picos como se puede apreciar en la Figura 2.

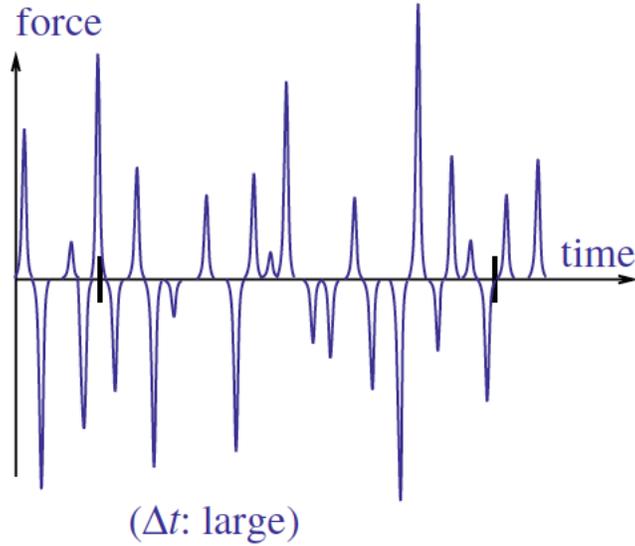


Figura 2: Esquema representativo el cuál permite entender la fuerza que va a experimentar una partícula browniana en un medio mesoscópico para un intervalo  $\Delta t \gg \tau_m$ . Tomada de [2].

El momento total transferido  $\Delta p = \int_{\Delta t} \hat{\xi}_{tot} dt$  durante el intervalo  $\Delta t$  va a presentar aproximadamente un comportamiento dado por una distribución Gaussiana, donde se denota como  $\hat{\xi}_{tot}$  la fuerza aleatoria térmica total que experimenta la partícula en el intervalo  $\Delta t$  [2].

Ahora supongamos que la partícula browniana se mueve en un sentido con velocidad  $v$  respecto al medio, el cuál se define en reposo. Es lógico pensar que la mayoría de colisiones que experimentará la partícula browniana vendrán de la dirección en la que se mueve dicho cuerpo [2]. Si se asume para velocidades no tan altas que el momento transferido va a depender linealmente de la velocidad  $v$ , se sigue que el valor medio de momento transferido en un tiempo  $\Delta t$  será igual a

$$\left\langle \int_{\Delta t} \hat{\xi}_{tot}(t) dt \right\rangle = -\gamma v \Delta t, \quad (16)$$

donde  $\gamma (> 0)$  es una constante que modela el arrastre o la fricción que genera la viscosidad medio y el signo menos se debe a que la fuerza asociada se opone al movimiento [2]. A partir de la descripción anterior, podemos entender que la fuerza térmica aleatoria  $\xi$  sigue siendo efectuada sobre la partícula browniana y corresponderá con un proceso estocástico Gaussiano con valor esperado  $\langle \xi \rangle = 0$  [2].

Con base en esto, para determinar completamente la fuerza aleatoria térmica como proceso estocástico

Gaussiano, se debe indicar el valor del Kernel  $K(t, t')$  asociado. De aquí se sigue que, como dos iteraciones del proceso estocástico deberían ser totalmente independientes, se propone lo siguiente

$$K(t, t') = \langle \hat{\xi}(t)\hat{\xi}(t') \rangle = 2b\delta(t - t'), \quad (17)$$

donde  $b$  será una constante por determinar y el factor de dos se incluye para simplificar la expresión de la función característica del modelo a consideración [2].

Cabe aclarar que cuando se considera  $t \neq t'$  en el delta de Dirac del Kernel, se sigue que  $|t - t'| \gg \tau_m$ , mientras que cuando se considera el caso  $t = t'$ , se sigue que  $|t - t'| \leq \Delta t$ , donde  $\Delta t \gg \tau_m$  [2].

Al reemplazar la ecuación (17) en las ecuaciones (13) y (14), se sigue que la fuerza térmica aleatoria está caracterizada por el proceso estocástico asociado a la siguiente función característica

$$\langle e^{i \int_{-\infty}^{\infty} \phi(t)\xi(t)dt} \rangle = e^{-b \int_{-\infty}^{\infty} \phi^2(t)dt}. \quad (18)$$

Ahora, tomando en cuenta el desarrollo anterior, se puede plantear la ecuación de Langevin, la cuál corresponde a analizar desde el punto de vista Newtoniano la dinámica de la partícula Browniana, tomando en consideración la fuerza térmica aleatoria  $\xi$  [2]. A partir de esto, si asumimos que la partícula browniana va a estar sujeta a una fuerza de arrastre dada por  $F = -\gamma v$  y una fuerza dada por un potencial  $U(t, x)$ , la ecuación de Langevin toma la forma

$$\frac{dp}{dt} = -\gamma \frac{p}{m} - \frac{\partial U}{\partial x} + \xi(t), \quad \frac{dx}{dt} = \frac{p}{m}. \quad (19)$$

La anterior ecuación de Langevin permite obtener conocimiento del valor de la constante  $b$  que se asumió para el valor del Kernel del proceso estocástico. Para ello, se seguirá la deducción dada por la relación de Einstein [2]. Consideremos una partícula browniana en un medio térmico, la cuál no está siendo sometida a un potencial  $U$ . De esto, se sigue que la ecuación de Langevin toma la forma

$$\frac{dp}{dt} = -\gamma \frac{p}{m} + \xi(t), \quad (20)$$

de la cuál, podemos obtener una solución para  $p$  dada por

$$p(t) = \int_0^t e^{(\gamma/m)(t-t')} \xi(t') dt'. \quad (21)$$

Ahora, si realizamos la sustitución  $u = t - t'$ , podemos reescribir la anterior solución como

$$p(t) = \int_0^t e^{-(\gamma/m)u} \xi(t-u) du. \quad (22)$$

Esta solución es de utilidad para calcular el valor medio de la energía cinética de la partícula en un tiempo que tiende a infinito, donde se tiene que

$$\frac{\overline{p^2}}{2m} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \frac{p^2(t')}{2m} dt'. \quad (23)$$

Al tener en cuenta la ecuación (22), esta expresión se puede reescribir como

$$\frac{\overline{p^2}}{2m} = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{e^{-\frac{\gamma}{m}(u_1+u_2)}}{2m} \left[ \frac{1}{t} \int_0^t \xi(t'-u_1) \xi(t'-u_2) dt' \right] du_1 du_2. \quad (24)$$

Si se tiene en cuenta la expresión del Kernel en la ecuación (17), se puede apreciar que

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \xi(t'-u_1) \xi(t'-u_2) dt' = \langle \xi(t'-u_1) \xi(t'-u_2) \rangle = 2b\delta(u_1 - u_2). \quad (25)$$

Si reemplazamos lo anterior en la ecuación para el valor medio de la energía cinética en un tiempo que tiende a infinito, se llega a lo siguiente

$$\frac{\overline{p^2}}{2m} = \frac{b}{2\gamma}. \quad (26)$$

Ahora, como la energía cinética promedio en un tiempo que tiende a infinito debe converger al promedio probabilístico del sistema, se puede calcular esta a partir de la función de partición canónica a temperatura  $T$ , lo que equivale a decir que se cumple el teorema de la equipartición de la energía [2]. Por ende, como se esta trabajando con una partícula browniana unidimensional, se sigue que

$$\frac{\overline{p^2}}{2m} = \frac{k_B T}{2} \implies b = \gamma k_B T, \quad (27)$$

donde  $k_B$  es la constante de Boltzmann. A partir de este resultado, el Kernel del funcional característico de

la fuerza aleatoria térmica queda totalmente determinado por

$$K(t, t') = \langle \hat{\xi}(t)\hat{\xi}(t') \rangle = 2\gamma k_B T \delta(t - t'). \quad (28)$$

### 2.3. Máquina térmica irreversible con base en el ciclo de Carnot

Una vez analizado el tratamiento matemático para describir una partícula browniana, se pasará a modelar una máquina térmica irreversible con base en el ciclo de Carnot. Con este fin, se considerará la termodinámica de una partícula browniana confinada en un potencial cuadrático mediante pinzas ópticas. Este sistema logra reproducir con suficiente precisión un oscilador armónico unidimensional de rigidez  $k$  en un baño térmico a una temperatura  $T$  [4]. Es de resaltar que en el estudio aquí presentado, se considerará que el oscilador armónico se encuentra en el régimen sobre-amortiguado, el cuál establece la condición de que el momento no cambia respecto al tiempo, es decir,  $\overline{dp/dt} = 0$  [4]. De acuerdo con esto, la ecuación (19) de Langevin se puede reescribir como

$$\gamma \frac{dx}{dt} = -kx + \xi, \quad (29)$$

la cuál conviene expresar en los siguientes términos

$$\gamma \frac{dx^2}{dt} = -2kx^2 + 2\xi x. \quad (30)$$

Si se encuentra el valor medio de la anterior ecuación, se obtiene lo siguiente

$$\gamma \frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle = -2k \langle x^2 \rangle + 2 \langle \xi x \rangle. \quad (31)$$

Para poder hallar el valor esperado de  $\langle \xi x \rangle$ , se propone la siguiente solución particular para  $x$  a partir de la ecuación (29)

$$x(t) = \int_0^t e^{-\frac{k}{\gamma}(t-t')} \xi(t') dt'. \quad (32)$$

A partir de esta solución, se encuentra que el valor esperado de  $\langle \xi x \rangle$  viene dado por

$$\langle \xi(t)x(t) \rangle = \int_0^t e^{-\frac{k}{\gamma}(t-t')} \langle \xi(t)\xi(t') \rangle dt'. \quad (33)$$

Si recordamos la ecuación (28), la cual define el valor del Kernel para la fuerza aleatoria térmica, se llega

finalmente a que

$$\langle \xi x \rangle = k_B T. \quad (34)$$

Por ende, la ecuación (19) se puede expresar como

$$\gamma \frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle = -2k \langle x^2 \rangle + 2k_B T. \quad (35)$$

De esta descripción se puede apreciar que, para el rendimiento esperado de la máquina térmica en cualquier tiempo  $t$ , el sistema va a estar determinado completamente por el punto termodinámico  $(k, \langle x^2 \rangle, T)$  [4]. Asimismo, cuando la máquina térmica esta en equilibrio, se cumple que  $d \langle x^2 \rangle / dt = 0$  [4]. Por consiguiente, de la ecuación (35) se obtiene una superficie termodinámica asociada al equilibrio dada por

$$\langle x^2 \rangle_{\text{eq}} = \frac{k_B T}{k}. \quad (36)$$

Una vez establecida la descripción de la máquina térmica, se pasará a mencionar como se obtiene la energía promedio  $\langle E \rangle$  del sistema, así como el trabajo promedio  $\langle W \rangle$  y el calor promedio  $\langle Q \rangle$  que se transfieren en un determinado proceso. Para determinar la energía promedio  $\langle E \rangle$ , se tiene que la energía  $E$  de un oscilador armónico es igual a

$$E = \frac{1}{2} k x^2 + \frac{1}{2} m v^2. \quad (37)$$

Sin embargo, se está analizando el sistema en el régimen sobre-amortiguado, donde el teorema de la equipartición de la energía es válido [4]. Por ende, la energía promedio  $\langle E \rangle$  vendría dada por

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2} k \langle x^2 \rangle + \frac{1}{2} k_B T. \quad (38)$$

Ahora, al considerar la primera ley de la termodinámica como  $dE = \delta Q + \delta W$ , el trabajo promedio  $\langle W \rangle$  y el calor medio  $\langle Q \rangle$  transferidos desde un estado  $(k_A, \langle x_A^2 \rangle, T_A)$  hasta un estado  $(k_B, \langle x_B^2 \rangle, T_B)$  vienen dados por

$$\langle W_{AB} \rangle = \frac{1}{2} \int_A^B \langle x^2 \rangle dk, \quad (39)$$

$$\langle Q_{AB} \rangle = \frac{1}{2} \int_A^B k d \langle x^2 \rangle + k_B dT = \frac{1}{2} \int_A^B k d \langle x^2 \rangle + \frac{1}{2} k_B (T_B - T_A). \quad (40)$$

De las anteriores ecuaciones, se puede apreciar que en el plano  $(k, \langle x^2 \rangle)$ , el área bajo la curva corresponde al trabajo realizado  $W_{AB}$  para cualquier proceso de  $A$  a  $B$  [4]. Asimismo, de la primera ley de la termodinámica se debe cumplir que el trabajo  $W$  realizado por la máquina térmica a lo largo de un ciclo debe ser negativo  $W < 0$ .

Al considerar el desarrollo analizado en esta sección, se puede apreciar que es conveniente definir toda la termodinámica del sistema en términos de variables no dimensionales, esto con vistas en que las ecuaciones dependan de condiciones iniciales más generales, las cuales ignorarán las unidades físicas propias de cada una de las variables que caracterizan a la máquina térmica [4]. Para llevar a cabo esto, se introducen las siguientes variables adimensionales

$$\kappa = \frac{k}{k_0}, \quad \theta = \frac{T}{T_0}, \quad y = \frac{\langle x^2 \rangle}{\langle x^2 \rangle_{\text{eq},0}} = \frac{k_0}{k_B T_0} \langle x^2 \rangle, \quad s = \frac{k_0 t}{\gamma}. \quad (41)$$

De acuerdo con lo anterior, la ecuación de Langevin en la expresión (35) toma la forma

$$\frac{dy}{ds} = -2\kappa y + 2\theta. \quad (42)$$

Consecuentemente, el estado del sistema esta dado por el punto termodinámico  $(\kappa, y, \theta)$ . La ecuación (36) de equilibrio toma la forma

$$\kappa y_{\text{eq}} = \theta. \quad (43)$$

Además, la energía media normalizada  $\langle \mathcal{E} \rangle$ , el trabajo medio normalizado  $\langle \mathcal{W} \rangle$  y el calor medio normalizado  $\langle \mathcal{Q} \rangle$  se obtienen al normalizar por la energía media inicial en el equilibrio  $\langle E \rangle_{\text{eq},0} = k_B T_0$  [4]. A partir de esto, se obtiene que

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2}\kappa \langle y \rangle + \frac{1}{2}\theta, \quad (44)$$

$$\mathcal{W}_{AB} = \frac{1}{2} \int_A^B \langle y \rangle d\kappa, \quad (45)$$

$$\mathcal{Q}_{AB} = \frac{1}{2} \int_A^B \kappa d \langle y \rangle + \frac{1}{2}(\theta_B - \theta_A). \quad (46)$$

Por último, la primera ley de la termodinámica tomaría la forma  $d\mathcal{E} = \delta\mathcal{Q} + \delta\mathcal{W}$  y en el plano  $(\kappa, y)$ , el área bajo la curva corresponderá al trabajo normalizado realizado  $\mathcal{W}_{AB}$  para cualquier proceso de  $A$  a  $B$  [4].

Una vez establecidas las ecuaciones normalizadas que modelan la termodinámica esperada del sistema, se establece un ciclo irreversible construido a partir del ciclo de Carnot, el cuál va a operar entre dos reservorios de temperatura  $\theta_h$  y  $\theta_c$  [4]. Se considerarán dos procesos isotérmicos y dos procesos localmente adiabáticos para conectar los procesos isotérmicos (dada la irreversibilidad del ciclo) [4].

De la primera ley de la termodinámica se tiene que, en cada ciclo, se extrae calor  $\mathcal{Q}_h > 0$  y se realiza trabajo  $\mathcal{W} < 0$  [4]. Por último, en el plano  $(\kappa, y)$ , el ciclo corresponde a una curva cerrada que debe ser recorrida en sentido contrario a las manecillas del reloj [4]. A continuación, se presenta como se modelan las isothermas y las adiabatas.

### 2.3.1. Proceso Isotérmico óptimo

Para las isothermas, se busca maximizar el trabajo producido por el sistema. Con este objetivo en mente, se desarrolla un protocolo [4] el cuál establece que la varianza óptima  $\tilde{y}(s)$  debe evolucionar como

$$\tilde{y}(s) = \left[ \sqrt{y_A} + (\sqrt{y_B} - \sqrt{y_A}) \frac{s}{s_f} \right]^2, \quad (47)$$

donde  $s_f$  es el tiempo normalizado final del proceso [4]. Cabe resaltar que la varianza óptima  $\tilde{y}(s)$  es continua y esta definida para  $s \in [0, s_f]$  [4]. Asimismo, al despejar  $\kappa$  de la ecuación (42), se encuentra que la rigidez óptima  $\tilde{\kappa}(s)$  viene dada por

$$\tilde{\kappa}(s) = \frac{\theta}{\tilde{y}} - \frac{1}{2\tilde{y}} \frac{d\tilde{y}}{ds}, \quad (48)$$

que, al calcular la derivada del segundo término, se encuentra que  $\tilde{\kappa}(s)$  debe variar de la siguiente manera

$$\tilde{\kappa}(s) = \frac{\theta}{\tilde{y}} - \frac{1}{s_f} \left( \sqrt{\frac{y_B}{\tilde{y}}} - \sqrt{\frac{y_A}{\tilde{y}}} \right). \quad (49)$$

Es de recalcar que la evolución de la rigidez  $\tilde{\kappa}$  presenta discontinuidades al inicio y final del ciclo [4]. Esto se debe a que  $\tilde{\kappa}(0) = \kappa_A$  y  $\tilde{\kappa}(s_f) = \kappa_B$  dada la condición de equilibrio en la ecuación (43). Sin embargo, al evaluar la ecuación (49) en  $s = 0$  y  $s = s_f$  se encuentra que  $\tilde{\kappa}(0) \neq \kappa_A$  y  $\tilde{\kappa}(s_f) \neq \kappa_B$  debido al segundo término. Por lo tanto, la expresión (49) solo es válida para  $s \in (0, s_f)$  [4].

Es preciso señalar que estas discontinuidades de la rigidez  $\tilde{\kappa}$  al inicio y final del proceso involucrarán un trabajo asociado a dicho cambio abrupto [4].

Ahora, como el proceso es isotérmico, el cambio de energía  $\Delta\mathcal{E} = 0$ , ya que  $\mathcal{E}_A = \mathcal{E}_B = \theta$ . No obstante, la energía sí cambia a medida que se realiza el ciclo porque  $\mathcal{E} \neq \theta$ . Esto se debe a que, para  $0 < s < s_f$ , el proceso ocurre en el régimen donde no hay equilibrio, debido a que las evoluciones de la varianza óptima  $\tilde{y}$  y de la rigidez óptima  $\tilde{\kappa}$  no cumplen la ecuación (43) [4].

Finalmente, el trabajo óptimo  $\tilde{\mathcal{W}}$  y el calor óptimo  $\tilde{\mathcal{Q}}$  vendrán dados por

$$\tilde{\mathcal{W}} = \frac{\theta}{2} \ln \left( \frac{\kappa_B}{\kappa_A} \right) + \frac{\theta}{s_f} \left( \frac{1}{\sqrt{\kappa_B}} - \frac{1}{\sqrt{\kappa_A}} \right)^2, \quad \tilde{\mathcal{Q}} = -\tilde{\mathcal{W}}. \quad (50)$$

### 2.3.2. Proceso Adiabático óptimo

Para un proceso adiabático, se tiene que  $\mathcal{E}_A = \theta_A$  y  $\mathcal{E}_B = \theta_B$ . Por ende, el cambio de la energía viene dado por  $\Delta\mathcal{E} = \theta_B - \theta_A$ . Además, como no hay intercambio de calor  $\mathcal{Q} = 0$ , se encuentra que el trabajo va ser igual a  $\mathcal{W} = \mathcal{E}$  [4]. Estos resultados son válidos tanto para el caso cuasi-estático como para el caso en el que no hay equilibrio [4]. A pesar de ello, cuando no hay equilibrio, no se cumple la equivalencia entre proceso adiabático y proceso isentrópico [4]. Es de ahí que el ciclo en consideración sea irreversible.

Como se había mencionado, el trabajo es fijo para un proceso adiabático, por consiguiente, dicho trabajo no puede ser optimizado. Sin embargo, como se está tratando con un ciclo irreversible, dos estados arbitrarios no se pueden conectar mediante una adiabatada [4]. Esto resulta de la siguiente desigualdad válida para procesos cuasi-estáticos y fuera del equilibrio

$$\frac{\theta(s)}{\theta_A} \geq \frac{y_A}{y(s)}, \quad (51)$$

donde la igualdad solo se cumple para procesos cuasi-estáticos [4]. Con base en lo anterior, se tiene para cualquiera dos estados  $A$  y  $B$  que

$$\frac{\theta_B}{\theta_A} \geq \frac{y_A}{y_B} \iff \left( \frac{\theta_B}{\theta_A} \right)^2 \geq \frac{\kappa_B}{\kappa_A}. \quad (52)$$

Ahora, si se asume que efectivamente se tiene un proceso adiabático que conecta dos estados  $A$  y  $B$ , existiría un proceso óptimo, en el sentido que existe un mínimo tiempo  $\tilde{s}_f$  para el cual se lleva a cabo el proceso [4]. Este tiempo  $\tilde{s}_f$  viene dado por

$$\tilde{s}_f = \frac{(y_B - y_A)^2}{2(y_B\theta_B - y_A\theta_A)}. \quad (53)$$

El tiempo  $\tilde{s}_f$  mínimo es logrado para un protocolo [4] en el cuál la varianza y temperatura varían de la

siguiente forma

$$\tilde{y} = \sqrt{y_A} + (\sqrt{y_B} - \sqrt{y_A}) \frac{s}{s_f}, \quad (54)$$

$$\tilde{\theta} = \frac{y_A \theta_A + (y_B \theta_B - y_A \theta_A) \frac{s}{s_f}}{y_A + (y_B - y_A) \frac{s}{s_f}}. \quad (55)$$

Al igual que en el proceso isotérmico, estas variaciones de  $\tilde{y}$  y  $\tilde{\theta}$  son funciones suaves que están definidas para  $s \in [0, s_f]$  [4]. Asimismo, de la ecuación (46) se puede obtener la rigidez  $\tilde{\kappa}$ , ya que

$$\delta Q = \kappa dy + d\theta = 0 \implies \tilde{\kappa}(s) = -\frac{d\tilde{\theta}}{d\tilde{y}} = \frac{ds}{d\tilde{y}} \frac{d\tilde{\theta}}{ds}. \quad (56)$$

Al calcular lo anterior, se encuentra que la rigidez  $\tilde{\kappa}$  viene dada por

$$\tilde{\kappa} = \frac{\tilde{\theta}}{\tilde{y}} - \frac{\tilde{\theta}}{2\tilde{s}_f} (y_B - y_A). \quad (57)$$

Nuevamente la variación de  $\tilde{\kappa}$  no esta definida al inicio y al final del ciclo [4]. Esto se debe a que al inicio y al final se opera en el equilibrio, de modo que,  $\tilde{\kappa}(0) = \kappa_A$  y  $\tilde{\kappa}(s_f) = \kappa_B$ . Consecuentemente, la expresión (57) solo es válida para  $s \in (0, s_f)$  [4]. No obstante, esto no afecta el comportamiento adiabático del sistema, ya que estos cambios discontinuos se realizan casi instantáneamente y, por consiguiente, no hay flujo de calor [4]. Solo se presenta una contribución al trabajo producto de estos cambios discontinuos de la rigidez  $\tilde{\kappa}$  [4].

### 2.3.3. Condiciones del Ciclo en consideración

Una vez definidas las isothermas y adiabatas, se tiene que el ciclo de Carnot irreversible a simular esta dado por la Figura 3

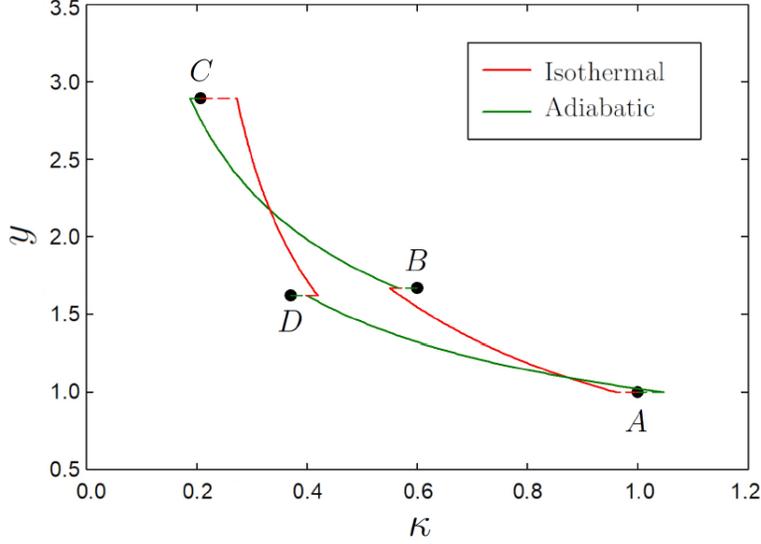


Figura 3: Ciclo desarrollado con base en el ciclo de Carnot. Note que las líneas punteadas indican el cambio abrupto asociado a la rigidez  $\tilde{\kappa}$ . Tomada de [4].

Para establecer los puntos  $A, B, C$  y  $D$ , se deben definir algunos parámetros que determinen el ciclo en su totalidad [4]. En primera instancia, se establecen los parámetros  $\nu$  y  $\chi$  que serán iguales a

$$\nu = \frac{\theta_B}{\theta_A}, \quad \chi = \frac{y_A}{y_B} = \frac{\kappa_B}{\kappa_A}, \quad (58)$$

donde  $\nu$  indica la razón entre las temperaturas  $\theta$  y  $\chi$  indica la razón ya sea entre la varianza  $y$  o la rigidez  $\kappa$ . La constante  $\nu$  se introduce para relacionar las temperaturas de los dos reservorios sobre los cuales va a operar la máquina térmica, mientras que  $\chi$  es la condición que se obtiene de la ecuación (43) del equilibrio al considerar los procesos isotérmicos [4].

Por otro lado, retomando lo descrito en la sección 2.3.3, para conectar los puntos de las isotermas con adiabatas se debe considerar la ecuación (52) [4]. A raíz de esto, se definen otras dos constantes  $c$  y  $d$ , asociadas a los puntos  $C$  y  $D$ , que permiten conectar las isotermas definidas por el parámetro  $\chi$

$$c = \frac{\kappa_C}{\nu^2 \chi} \leq 1, \quad d = \frac{\kappa_D}{\nu^2} \geq 1. \quad (59)$$

En la Figura 3 se puede apreciar que el estado inicial  $A$  toma los valores de  $\kappa = 1$  y  $y = 1$ . Con base en esto, en la Tabla 1 se resume las coordenadas  $(\kappa, y, \theta)$  para cada uno de los puntos del ciclo en consideración [4].

	$\kappa$	$y$	$\theta$
A	1	1	1
B	$\chi$	$\chi^{-1}$	1
C	$c\nu^2\chi$	$c^{-1}\nu^{-1}\chi^{-1}$	$\nu$
D	$d\nu^2$	$d^{-1}\nu^{-1}$	$\nu$

Tabla 1: Estados termodinámicos  $(\kappa, y, \theta)$  para los puntos  $A, B, C$  y  $D$  que conforman el ciclo irreversible con base en el ciclo de Carnot. Tomado de [4].

### 3. Simulación y Resultados

La presente máquina térmica mesoscópica se simuló mediante un código desarrollado a partir del lenguaje de programación de Python <sup>1</sup>. Para calcular la evolución de la posición  $x$  de la partícula browniana a medida que se realiza un proceso determinado, se considero la ecuación (29) mediante diferencias finitas

$$\gamma \frac{\Delta x}{\Delta t} = -kx + \xi, \quad (60)$$

donde  $\Delta x = x_{i+1} - x_i$  y  $\Delta t$  va a ser el intervalo de tiempo que determina la evolución de  $x$ . A partir de esto, se tiene que la posición en un instante de tiempo  $x_{i+1}$  viene dado por

$$x_{i+1} = \frac{\Delta t}{\gamma} (\xi_i - k_i x_i) + x_i. \quad (61)$$

Cabe aclarar que  $\xi_i$  ahora debe entenderse como la fuerza aleatoria térmica que ocurre en el instante  $x_i$ . Para programar el comportamiento  $\xi_i$ , se utilizó el método `np.random.normal(loc, scale)` de `numpy`, el cuál permite generar un número que proviene de una densidad de probabilidad normal, donde `loc` indica el promedio  $\mu$  y `scale` la desviación estándar  $\sigma$ . A partir de esto, con vistas en reproducir la fuerza térmica aleatoria, se escogió un valor promedio de  $\mu = 0$  y una desviación estándar de  $\sigma = \sqrt{2\gamma k_B T}$ , acorde con la definición de varianza tratada en la sección 2.1 y la definición del Kernel dado en la ecuación (28).

Por otra parte, se consideró los siguientes valores para los parámetros que caracterizan al ciclo:  $\nu = 0,6$ ,  $\chi = 0,6$ ,  $c = 0,96$  y  $d = 1,03$ .

Para finalizar, con el fin de generar la equivalencia entre las variables usuales y las normalizadas, se tomó la siguiente convención  $k_0 = 1$ ,  $T_0 = 1$ ,  $k_B = 1$  y  $\gamma = 1$ . A partir de esto, las definiciones dadas en la ecuación

<sup>1</sup>El respectivo código se encuentra disponible en el siguiente repositorio de GitHub: <https://github.com/DanielVC20/Proy-Maquinas-Termicas-Mesoscopicas>

(41) toman la forma

$$\kappa = k, \quad \theta = T, \quad y = x^2, \quad s = t. \quad (62)$$

Esto se realiza con vistas en facilitar la conexión entre la manera en la que se calcula en cada iteración la fuerza aleatoria  $\xi$  que experimenta la partícula para evolucionar la posición  $x$ , con las expresiones propias del protocolo que indican como varía  $\kappa, \theta$  y  $y$ . Cabe aclarar que, al analizar o graficar los resultados de las variables anteriores, se debe tener en cuenta el orden de magnitud correspondiente, tal que el valor de las variables calculadas sobre las múltiples iteraciones se correspondan con el orden de magnitud de las variables óptimas calculadas.

A continuación, se muestra lo encontrado a partir del código que se desarrolló.

En primera instancia, se graficó para cada uno de los procesos que compone al ciclo lo siguiente en el plano  $(\kappa, y)$  :

- La varianza óptima  $\tilde{y}(s)$  en función de la rigidez óptima  $\tilde{\kappa}(s)$ .
- El valor medio de  $y(s)$  obtenido al evolucionar la posición  $x$  (dada por la ecuación (61) tomando como  $\Delta t = 1 \times 10^{-3}$ ) para  $1 = 10000$  puntos en función de la rigidez óptima  $\tilde{\kappa}(s)$  para un total de `cant = 1000` iteraciones.

Con base en esto, se obtuvo la Figura 4 para la compresión isotérmica, la Figura 5 para la compresión adiabática, la Figura 6 para la expansión isotérmica y la Figura 7 para la expansión adiabática.

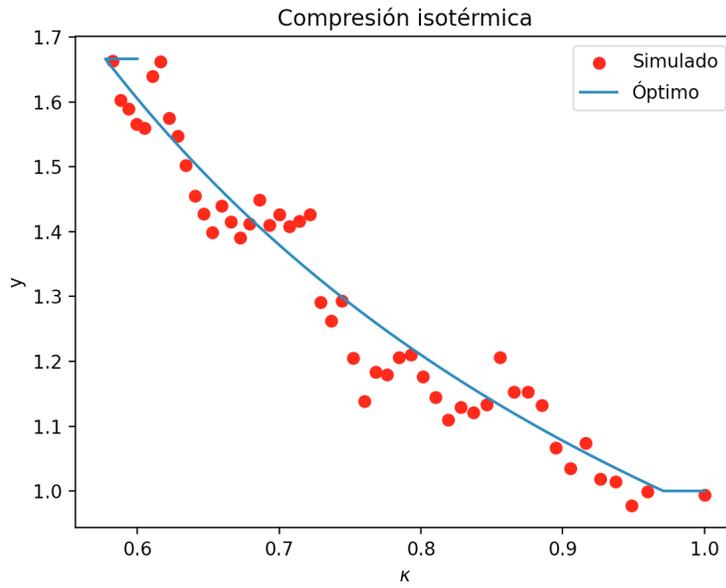


Figura 4: Proceso de compresión isotérmica en el plano termodinámico  $(\kappa, y)$  donde: en azul se graficó la varianza óptima  $\tilde{y}(s)$  vs la rigidez óptima  $\tilde{\kappa}(s)$ ; en rojo se denota el valor medio  $\langle y \rangle$  simulado vs la rigidez óptima  $\tilde{\kappa}(s)$ . Cabe aclarar que los puntos siguen un paso de 200 a comparación de la cantidad total de puntos  $l = 10000$ .

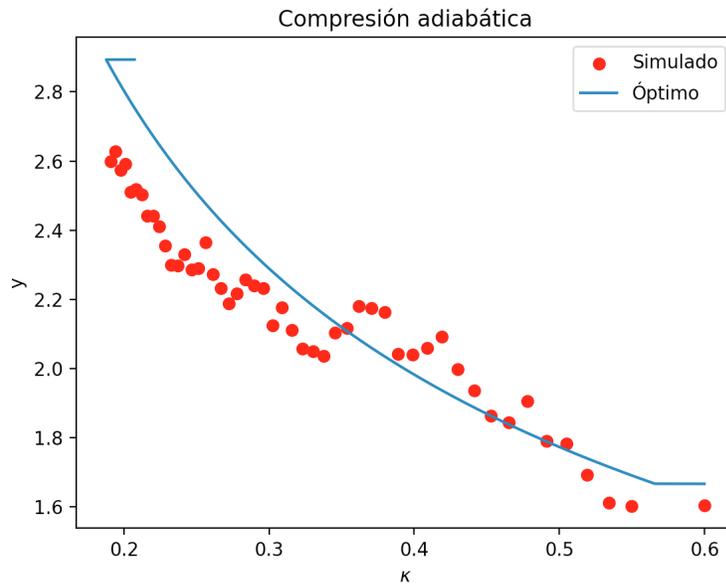


Figura 5: Proceso de compresión adiabática en el plano termodinámico  $(\kappa, y)$  donde: en azul se graficó la varianza óptima  $\tilde{y}(s)$  vs la rigidez óptima  $\tilde{\kappa}(s)$ ; en rojo se denota el valor medio  $\langle y \rangle$  simulado vs la rigidez óptima  $\tilde{\kappa}(s)$ . Cabe aclarar que los puntos siguen un paso de 200 a comparación de la cantidad total de puntos  $l = 10000$ .

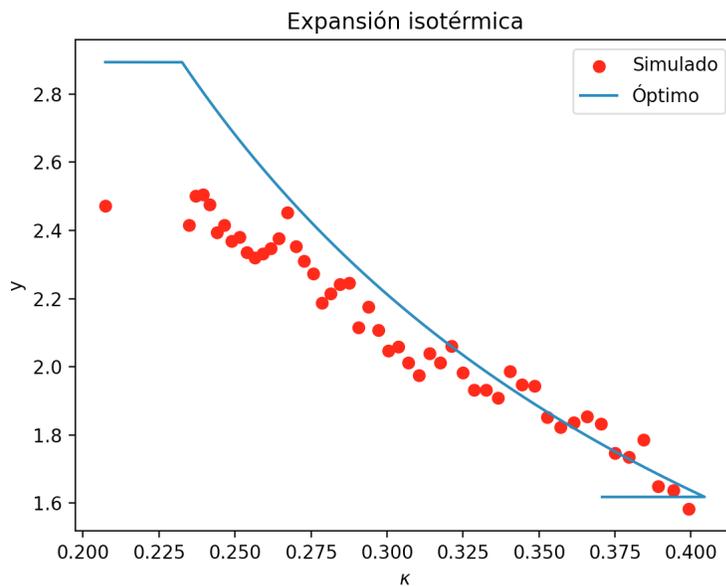


Figura 6: Proceso de expansión isotérmica en el plano termodinámico  $(\kappa, y)$  donde: en azul se graficó la varianza óptima  $\tilde{y}(s)$  vs la rigidez óptima  $\tilde{\kappa}(s)$ ; en rojo se denota el valor medio  $\langle y \rangle$  simulado vs la rigidez óptima  $\tilde{\kappa}(s)$ . Cabe aclarar que los puntos siguen un paso de 200 a comparación de la cantidad total de puntos  $l = 10000$ .

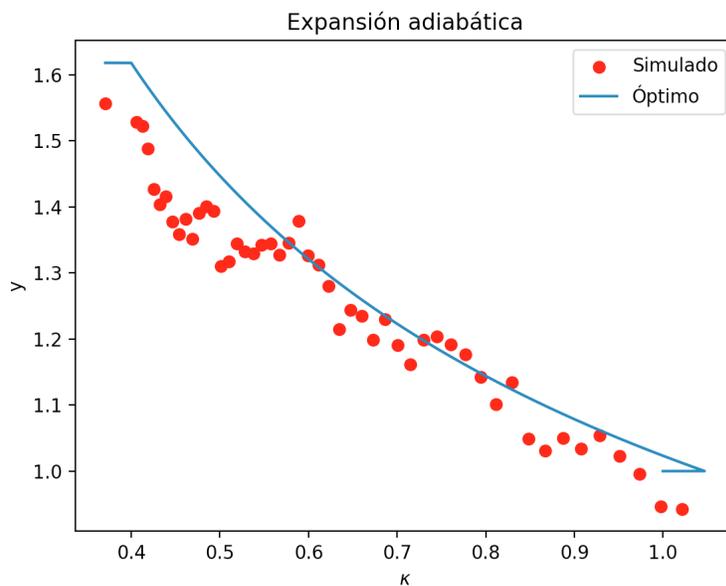


Figura 7: Proceso de expansión adiabática en el plano termodinámico  $(\kappa, y)$  donde: en azul se graficó la varianza óptima  $\tilde{y}(s)$  vs la rigidez óptima  $\tilde{\kappa}(s)$ ; en rojo se denota el valor medio  $\langle y \rangle$  simulado vs la rigidez óptima  $\tilde{\kappa}(s)$ . Cabe aclarar que los puntos siguen un paso de 200 a comparación de la cantidad total de puntos  $l = 10000$ .

Se puede apreciar que, para los valores establecidos de los parámetros  $\Delta t$ , **cant** y **l**, los valores medios  $\langle y \rangle$  simulados que se presentes desde la Figura 4 hasta la Figura 7 se aproximan en buen medida al valor teórico dado por la varianza óptima  $\tilde{y}(s)$ . Sin embargo, es evidente que los valores medios  $\langle y \rangle$  presentan fluctuaciones considerables. Esto se debe posiblemente al bajo valor empleado para el parámetro **cant**. También cabe resaltar que la Figura 6 no presenta el comportamiento esperado al inicio de la expansión isotérmica.

Por otro lado, desde la Figura 8 hasta la Figura 11 se gráfico el trabajo estocástico  $\mathcal{W}_{\text{est}}$  para cada uno de los procesos considerados. Para calcular dicho trabajo estocástico, se consideró la siguiente ecuación

$$\mathcal{W}_{\text{est}} = \sum_{i=0}^{l-1} \mathcal{U}_{i+1}(k_{i+1}, x_{i+1}) - \mathcal{U}_i(k_i, x_i) = \sum_{i=0}^{l-1} \frac{1}{2} \kappa_{i+1} y_{i+1} - \frac{1}{2} \kappa_i y_i. \quad (63)$$

Por ende, para cada una de las **cant**=1000 iteraciones, se tomaron en cuenta cada uno de los **l**=10000 puntos  $(\kappa, y)$  y se fue realizando la suma iterativa para encontrar el trabajo estocástico  $\mathcal{W}_{\text{est}}$ . Asimismo, se calculó y graficó: el promedio y desviación estándar del trabajo estocástico  $\mathcal{W}_{\text{est}}$  junto al trabajo óptimo  $\tilde{\mathcal{W}}$  dado por las ecuaciones vistas en las secciones que definían cada uno de los procesos.

Tomando en cuenta lo anterior, se muestran los resultados para: la compresión isotérmica en la Figura 8, la compresión adiabática en la Figura 9, la expansión isotérmica en la Figura 10 y la expansión adiabática en la Figura 11.

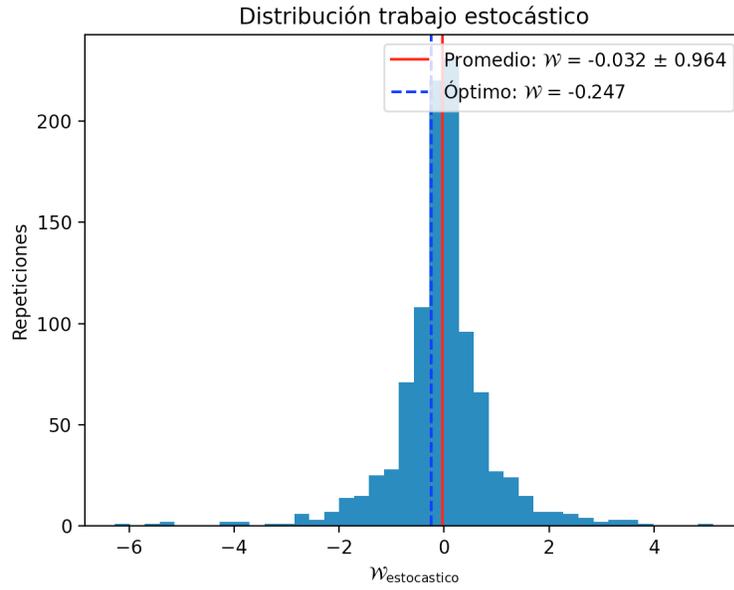


Figura 8: Distribución del trabajo estocástico  $\mathcal{W}_{\text{est}}$  para la compresión isotérmica. Además, se presenta el trabajo estocástico promedio  $\langle \mathcal{W} \rangle$  con una línea roja, mientras que el trabajo óptimo  $\tilde{\mathcal{W}}$  se denota con una línea punteada azul. Por último, en la leyenda de la gráfica se pueden ver los valores calculados para el trabajo estocástico promedio  $\langle \mathcal{W} \rangle$  y el trabajo óptimo  $\tilde{\mathcal{W}}$ .

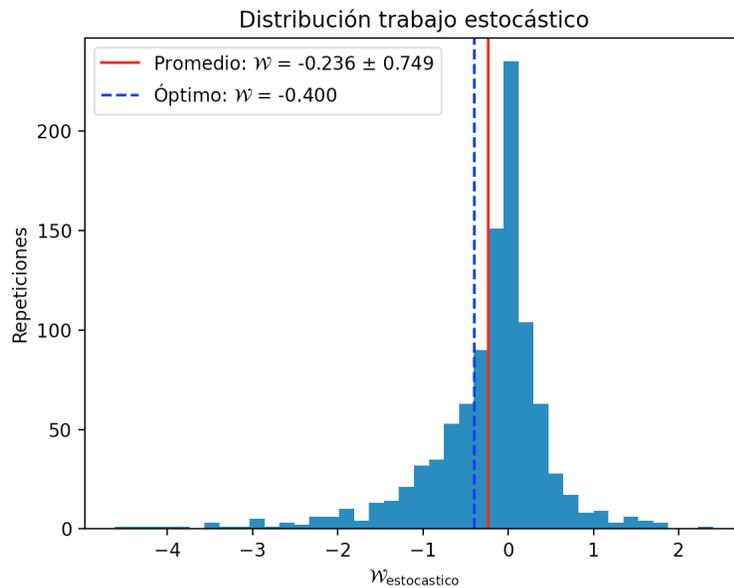


Figura 9: Distribución del trabajo estocástico  $\mathcal{W}_{\text{est}}$  para la compresión adiabática. Además, se presenta el trabajo estocástico promedio  $\langle \mathcal{W} \rangle$  con una línea roja, mientras que el trabajo óptimo  $\tilde{\mathcal{W}}$  se denota con una línea punteada azul. Por último, en la leyenda de la gráfica se pueden ver los valores calculados para el trabajo estocástico promedio  $\langle \mathcal{W} \rangle$  y el trabajo óptimo  $\tilde{\mathcal{W}}$ .

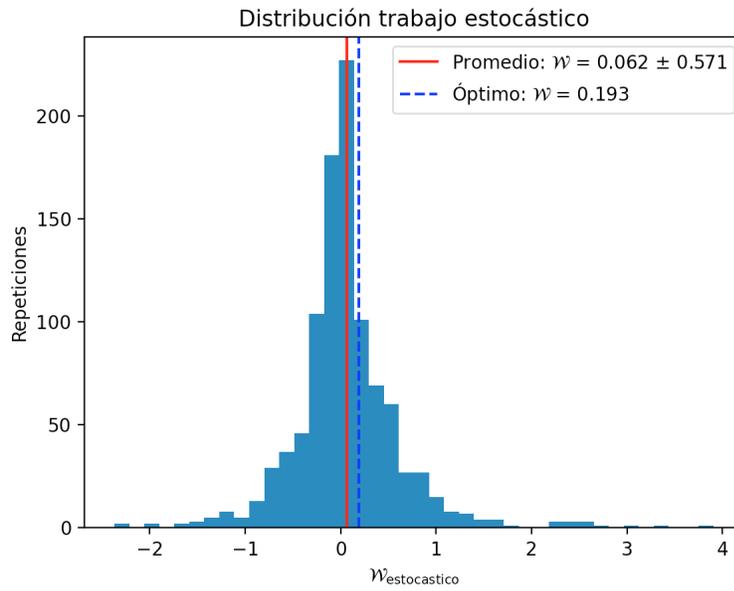


Figura 10: Distribución del trabajo estocástico  $\mathcal{W}_{\text{est}}$  para la expansión isotérmica. Además, se presenta el trabajo estocástico promedio  $\langle \mathcal{W} \rangle$  con una línea roja, mientras que el trabajo óptimo  $\tilde{\mathcal{W}}$  se denota con una línea punteada azul. Por último, en la leyenda de la gráfica se pueden ver los valores calculados para el trabajo estocástico promedio  $\langle \mathcal{W} \rangle$  y el trabajo óptimo  $\tilde{\mathcal{W}}$ .

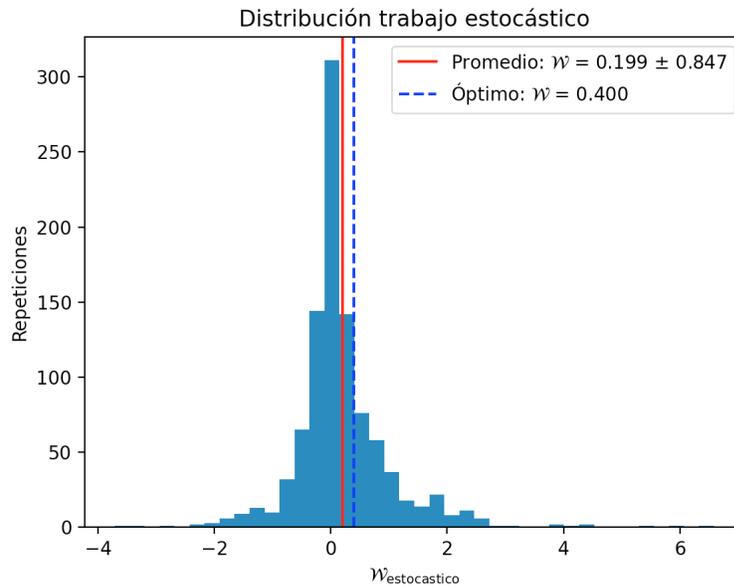


Figura 11: Distribución del trabajo estocástico  $\mathcal{W}_{\text{est}}$  para la expansión adiabática. Además, se presenta el trabajo estocástico promedio  $\langle \mathcal{W} \rangle$  con una línea roja, mientras que el trabajo óptimo  $\tilde{\mathcal{W}}$  se denota con una línea punteada azul. Por último, en la leyenda de la gráfica se pueden ver los valores calculados para el trabajo estocástico promedio  $\langle \mathcal{W} \rangle$  y el trabajo óptimo  $\tilde{\mathcal{W}}$ .

De la Figura 8 hasta la Figura 11 se puede apreciar que el trabajo estocástico promedio  $\langle \mathcal{W} \rangle$  y el trabajo óptimo  $\tilde{\mathcal{W}}$  comparten el mismo orden de magnitud. Por otro lado, se puede apreciar que el intervalo en el cuál se encuentra el trabajo estocástico promedio  $\langle \mathcal{W} \rangle$  coincide con el trabajo óptimo  $\tilde{\mathcal{W}}$ . Sin embargo, es de resaltar que el trabajo estocástico promedio  $\langle \mathcal{W} \rangle$  presenta una alta dispersión, dada muy posiblemente al bajo número de iteraciones `cant` consideradas.

Adicionalmente, se realizó la Figura 12, la cuál presenta la varianza óptima  $\tilde{y}(s)$  y el valor medio  $\langle y \rangle$  para cada uno de los procesos que componen al ciclo. Es relevante indicar que la Figura 12 complementa la información inicial de la Figura 3 la cuál se encuentra en la sección 2.3.3.

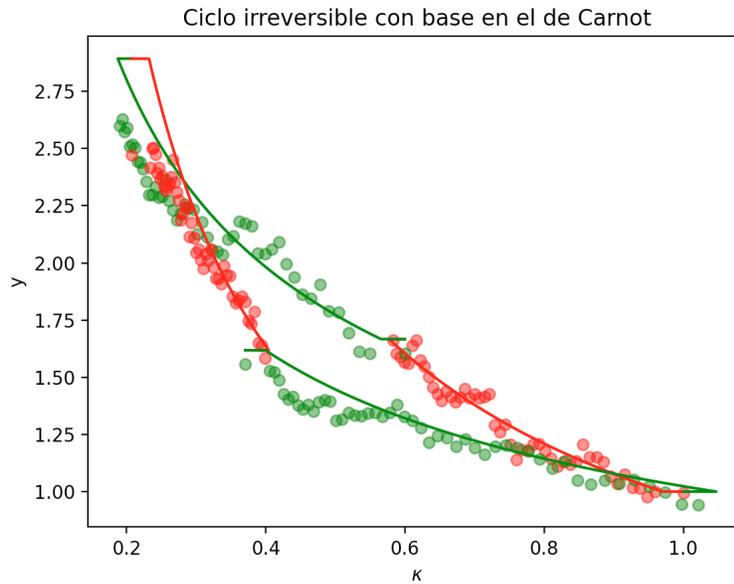


Figura 12: Ciclo irreversible con base en el ciclo de Carnot considerado en el plano termodinámico  $(\kappa, y)$ . En rojo se graficó los procesos isotérmicos y en verde los procesos adiabáticos. La línea sólida indica la varianza óptima  $\tilde{y}(s)$  en función de la rigidez óptima  $\tilde{\kappa}(s)$  y los puntos denotan el valor medio  $\langle y \rangle$  simulado en función de la rigidez óptima  $\tilde{\kappa}(s)$ . Es preciso señalar que los puntos siguen un paso de 200 a comparación de la cantidad total de puntos  $l = 10000$ .

Por último, en la Figura 13 se presenta el trabajo estocástico total  $\mathcal{W}_{\text{est,tot}}$  del ciclo, el cuál se obtuvo al sumar todos los trabajos estocásticos de cada uno de los procesos que componen al ciclo. De la misma manera, se calculó y graficó: el promedio y desviación estándar del trabajo estocástico total  $\langle \mathcal{W}_{\text{tot}} \rangle$  junto al trabajo óptimo total  $\tilde{\mathcal{W}}_{\text{tot}}$ .

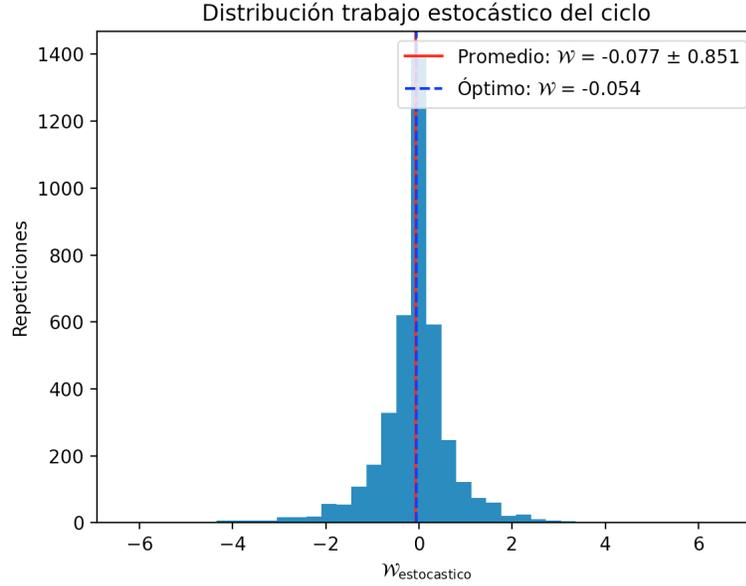


Figura 13: Distribución del trabajo estocástico total  $\mathcal{W}_{\text{est,tot}}$  para el ciclo irreversible con base en el ciclo de Carnot. Además, se presenta el trabajo estocástico promedio total  $\langle \mathcal{W}_{\text{tot}} \rangle$  con una línea roja, mientras que el trabajo óptimo total  $\tilde{\mathcal{W}}_{\text{tot}}$  se denota con una línea punteada azul. Por último, en la leyenda de la gráfica se pueden ver los valores de cada una de las variables anteriores.

De la Figura 13 se puede apreciar nuevamente que el trabajo estocástico promedio total  $\langle \mathcal{W}_{\text{tot}} \rangle$  y el trabajo óptimo total  $\tilde{\mathcal{W}}_{\text{tot}}$  comparten orden de magnitud. De la misma forma, se puede apreciar que el intervalo en el cuál se encuentra el trabajo estocástico promedio total  $\langle \mathcal{W}_{\text{tot}} \rangle$  coincide con el trabajo óptimo total  $\tilde{\mathcal{W}}_{\text{tot}}$ . Sin embargo, es de resaltar que el trabajo estocástico promedio total  $\langle \mathcal{W}_{\text{tot}} \rangle$  también presenta una alta dispersión, dada probablemente por el bajo número de iteraciones `cant` consideradas.

## 4. Conclusiones

En este proyecto se caracterizó y simuló una máquina térmica mesoscópica que opera con un ciclo irreversible basado en el ciclo de Carnot, donde esta se compone de una partícula browniana en un medio mesoscópico atrapada en un potencial mediante unas pinzas ópticas. Para ello, se familiarizó y desarrolló el marco teórico para comprender el tratamiento físico y matemático que involucra el estudio de máquinas térmicas mesoscópicas. Con este objetivo en mente, se presentó un resumen detallado de: el proceso que permite establecer el concepto de proceso estocástico; el cómo se puede comprender las fluctuaciones térmicas de una partícula browniana mediante el estudio de la fuerza aleatoria térmica, la cuál es un proceso estocástico; los conceptos necesarios y los protocolos considerados [4] para poder construir una máquina térmica mesoscópica que opere

con un ciclo irreversible basado en el ciclo de Carnot. Una vez elaborado todo el marco teórico, se procedió a describir el código realizado, con vistas en obtener resultados a partir de la propia simulación realizada y del contraste con los valores teóricos de las variables simuladas. Se evidenció que las simulaciones fueron acorde a los valores óptimos dados por el protocolo de la máquina térmica mesoscópica. Sin embargo, estos presentaban una variabilidad considerable, resultado de considerar un número de iteraciones `cant = 1000` no muy alto. Por último, se calculó el trabajo estocástico  $\mathcal{W}_{\text{est}}$  para cada uno de los procesos que componen el ciclo y para el ciclo en su totalidad, permitiendo obtener, consecuentemente, el valor del trabajo medio  $\langle \mathcal{W} \rangle$  para cada uno de los procesos y el valor del trabajo medio total  $\langle \mathcal{W}_{\text{tot}} \rangle$  del ciclo. Para verificar la validez de los cálculos anteriores, se determinó el trabajo óptimo  $\tilde{\mathcal{W}}$  de cada uno de los procesos y trabajo óptimo total  $\tilde{\mathcal{W}}_{\text{tot}}$  del ciclo. Esto permitió evidenciar que los resultados obtenidos mediante la simulación coinciden con los valores teóricos. No obstante, nuevamente los trabajos medios obtenidos presentaban una alta variabilidad muy probablemente a causa de considerar un número de iteraciones `cant = 1000` no muy alto.

## Referencias

- [1] R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. L. Sands. *The Feynman lectures on physics*. ed. Addison-Wesley, 1963.
- [2] K. Sekimoto. *Stochastic Energetics*. ed. Springer, 2010.
- [3] I. A. Martínez, E. Roldán, L. Dinis, D. Petrov, J. M. R. Parrondo, and R. A. Rica. Brownian carnot engine. *Nature Physics*, vol. 12:p. 67–70, 2015.
- [4] Carlos A Plata, David Guéry-Odelin, Emmanuel Trizac, and A Prados. Building an irreversible carnot-like heat engine with an overdamped harmonic oscillator. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2020.