

RESOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE FOKKER-PLANCK POR EL MÉTODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Juan P. Umazano^{a,b}, Jorge A. Bertolotto^b

^a*Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de La Pampa, Avda. Uruguay 151,
6300 Santa Rosa, Argentina, pumazano@exactas.unlpam.edu.ar*

^b*Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET)*

Keywords: ecuación de Fokker-Planck, método de diferencias finitas, función de distribución angular.

Abstract. Mediante técnicas electro-ópticas es posible estudiar las propiedades eléctricas, ópticas e hidrodinámicas de moléculas de ADN en solución. A tales efectos es necesario conocer el grado de orientación que adquieren las moléculas al aplicar sobre la solución un campo eléctrico externo.

Para describir adecuadamente la orientación de moléculas de ADN con longitudes de cadena mayores a 500 Å es necesario incluir el acoplamiento entre los movimientos de traslación y rotación de las moléculas. Este acoplamiento se debe a que las moléculas de ADN con las dimensiones antes dichas deben ser descritas con modelos que tengan en cuenta la curvatura de la molécula. En tales casos, la función de distribución orientacional no es Boltzmanniana y se debe obtener resolviendo la ecuación de Fokker-Planck del sistema. Hasta la actualidad las soluciones obtenidas utilizando métodos analíticos son válidas solamente si el campo eléctrico aplicado es de baja intensidad.

En este trabajo resolvemos la ecuación de Fokker-Planck empleando el método numérico de diferencias finitas a fin de obtener la función de distribución orientacional de estado estacionario de moléculas de ADN en un campo eléctrico de intensidad arbitraria.

1 INTRODUCTION

Las técnicas electro-ópticas constituyen una herramienta útil para determinar propiedades eléctricas, ópticas e hidrodinámicas de moléculas en solución. Básicamente, éstas técnicas consisten en estudiar la anisotropía óptica que se induce en la solución al aplicar sobre ella un campo eléctrico externo. Éste último tiene por efecto orientar las moléculas en solución hacia una dirección preferencial en el espacio. Las teorías electro-ópticas, tales como las teorías para la birrefringencia o el dicroísmo eléctricos, requieren conocer la función de distribución orientacional de las moléculas en presencia del campo eléctrico externo (Fredericq y Houssier, 1973)

En el caso de fragmentos de ADN con longitudes de hasta 500 Å las propiedades moleculares pueden describirse adecuadamente en base a modelos con simetría cilíndrica, como por ejemplo el modelo de varilla recta. Los fragmentos con estas longitudes se orientan preferencialmente en el espacio debido a la interacción entre su momento dipolar eléctrico inducido y el campo eléctrico aplicado. En esta circunstancia la función de distribución para el estado estacionario se sabe es Boltzmanniana. Para fragmentos de ADN con longitudes mayores a 500 Å el problema es más complejo debido a que la curvatura de los fragmentos debe ser un factor a considerar. Surgen así otros modelos moleculares como, por ejemplo, el macroion tipo arco (MTA). Al utilizar modelos curvos es necesario considerar el acoplamiento entre los movimientos de traslación y rotación que tiene lugar durante la migración electroforética. El proceso de acoplamiento es un fenómeno disipativo y, por lo tanto, la función de distribución debe calcularse a través de la ecuación de Fokker-Planck del sistema.

La ecuación de Fokker-Planck para el MTA polarizable, no polar, con carga eléctrica neta, ha sido resuelta en forma analítica por Bertolotto et. al (2004) utilizando un método de perturbación (MP). La solución que obtienen es adecuada para describir la orientación de fragmentos inducida por campos eléctricos de intensidades menores a $2\text{KV}/\text{cm}$, aproximadamente. Considerando que en un experimento de electro-óptica típico el rango de valores para la intensidad del campo eléctrico es de hasta $20\text{KV}/\text{cm}$ aproximadamente, resulta de interés resolver la ecuación de Fokker-Planck para intensidades mayores al límite de $2\text{KV}/\text{cm}$ que exige el usar el MP.

En general, la resolución analítica de la ecuación de Fokker-Planck para un problema dado es de difícil realización. Alternativamente, es posible implementar métodos de resolución numéricos como el método de diferencias finitas (MDF). Un estudio sobre la implementación del MDF para resolver la ecuación de Fokker-Planck ha sido realizado por Chang y Cooper (1970).

En este trabajo calculamos la función de distribución orientacional de moléculas de ADN en presencia de un campo eléctrico de intensidad arbitraria en el estado estacionario. Las moléculas son descritas mediante el modelo MTA y el acoplamiento entre los movimientos de traslación y rotación es incluido. Para determinar la función de distribución resolvemos la ecuación de Fokker-Planck utilizando el método numérico de diferencias finitas (MDF). Los resultados obtenidos numéricamente se comparan con la solución analítica obtenida por Bertolotto et. al (2004) con el MP. Además, para estimar el error cometido con el MDF se analizan casos particulares para los que la función de distribución se conoce con exactitud.

2 TEORÍA

El sistema a estudiar es una solución diluida de fragmentos de ADN que se describen con

el modelo MTA. Desde un punto de vista geométrico cada MTA se caracteriza por el arco de circunferencia de longitud L y su radio r . La suposición de solución diluida permite omitir toda clase de interacción entre los fragmentos de ADN.

En este trabajo las propiedades físicas de interés del MTA son sus propiedades eléctricas e hidrodinámicas, caracterizadas por su carga eléctrica neta q , su tensor polarizabilidad eléctrica $[\alpha^E]$, su tensor de difusión rotacional $[R]$ y su tensor de difusión de acoplamiento traslación rotación $[P]$.

El sistema de coordenadas molecular $OXYZ$ se define de manera que el MTA se ubica en el plano $X-Z$ en dicho sistema y su centro de masa coincide con el origen de coordenadas. La posición y orientación del sistema de coordenadas molecular respecto del sistema de coordenadas del laboratorio $O'X'Y'Z'$ se determinan mediante las coordenadas x', y', z' del origen O y los tres ángulos de Euler ϕ, θ y ψ , respectivamente. La dirección del eje Z' del sistema de coordenadas del laboratorio coincide con la dirección en que se aplica el campo eléctrico externo, de intensidad E , que induce una dirección preferencial en el espacio para la orientación de los fragmentos de ADN.

Sea $f(\Omega, t)$, donde $\Omega = \langle x', y', z', \phi, \theta, \psi \rangle$, la densidad de probabilidad de encontrar una molécula con coordenadas entre Ω y $\Omega + d\Omega$ en el instante t respecto del sistema del laboratorio. Para determinar $f(\Omega, t)$ debemos resolver la ecuación de Fokker-Planck del sistema. La misma viene dada por (Bertolotto, 2007)

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{1}{\text{sen}\theta} \bar{\nabla} \cdot \left(\mathbf{M}_1 f - \frac{1}{2} \text{sen}\theta [M_2] \bar{\nabla} f \right) \quad (1)$$

donde $\bar{\nabla} = \langle \partial/\partial x', \partial/\partial y', \partial/\partial z', \partial/\partial \phi, \partial/\partial \theta, \partial/\partial \psi \rangle$ y \mathbf{M}_1 y $[M_2]$ son los momentos de deriva y difusión, respectivamente.

Debido a que estamos interesados en la orientación de las moléculas una vez alcanzado el estado estacionario omitiremos la dependencia de f con el tiempo. Por otro lado, no incluiremos la dependencia de f con las coordenadas x', y', z' porque suponemos que el movimiento electroforético no alcanza a modificar apreciablemente la concentración espacial de moléculas en el tiempo en que se alcanza el equilibrio orientacional. Bajo estas consideraciones Bertolotto et. al. (2004) desarrollan la ecuación de Fokker-Planck para el estado estacionario en el caso de moléculas polarizables, no polares, con carga eléctrica neta, en presencia de un campo eléctrico externo. La deducción es algo extensa y aquí simplemente presentaremos el resultado final

$$\left(D_{\theta\theta} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + D_{\psi\psi} \frac{\partial^2}{\partial \psi^2} + D_{\psi\theta} \frac{\partial^2}{\partial \psi \partial \theta} + D_{\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + D_{\psi} \frac{\partial}{\partial \psi} + D_{00} \right) f = 0 \quad (2)$$

donde

$$D_{\theta\theta} = (R_{11} \cos^2 \psi + R_{22} \text{sen}^2 \psi)$$

$$D_{\psi\psi} = (R_{11} \text{sen}^2 \psi \cot^2 \theta + R_{22} \cos^2 \psi \cot^2 \theta + R_{33})$$

$$D_{\psi\theta} = 2(R_{22} - R_{11}) \text{sen} \psi \cos \psi \cot \theta$$

$$\begin{aligned}
D_{\theta} &= \cot \theta (R_{11} \operatorname{sen}^2 \psi + R_{22} \cos^2 \psi) - \frac{E^2}{kT} \cos \theta \operatorname{sen} \theta [(a_{22} - a_{33}) R_{11} \cos^2 \psi - (a_{33} - a_{11}) R_{22} \operatorname{sen}^2 \psi] \\
&\quad + \frac{Eq}{kT} P_{23} \cos \theta \operatorname{sen} \psi \\
D_{\psi} &= \frac{\cos \psi}{\operatorname{sen}^2 \theta} \left\{ \frac{E^2}{kT} \operatorname{sen}^2 \theta \operatorname{sen} \psi [R_{33} (a_{22} - a_{11}) \operatorname{sen}^2 \theta + R_{22} (a_{33} - a_{11}) \cos^2 \theta + R_{11} (a_{22} - a_{33}) \cos^2 \theta] \right. \\
&\quad \left. + \frac{Eq}{kT} \operatorname{sen} \theta (P_{23} \cos^2 \theta - P_{32} \operatorname{sen}^2 \theta) + (R_{11} - R_{22}) \operatorname{sen} \psi (\cos^2 \theta + 1) \right\} \\
D_{00} &= -\frac{1}{\operatorname{sen} \theta} \left[\frac{Eq}{kT} (P_{23} - P_{32}) \operatorname{sen} \psi \operatorname{sen}^2 \theta + \frac{E^2}{kT} R_{33} (a_{11} - a_{22}) \operatorname{sen}^3 \theta (2 \cos^2 \psi - 1) + \frac{E^2}{kT} R_{11} \right. \\
&\quad \left. (a_{22} - a_{33}) \operatorname{sen} \theta (\cos^2 \theta - \operatorname{sen}^2 \theta \cos^2 \psi) + \frac{E^2}{kT} R_{22} (a_{33} - a_{11}) \operatorname{sen} \theta (\operatorname{sen}^2 \theta \operatorname{sen}^2 \psi - \cos^2 \theta) \right]
\end{aligned}$$

k es la constante de Boltzmann, T la temperatura absoluta, a_{ii} con $i = 1, 2, 3$ los elementos del tensor polarizabilidad eléctrica, R_{ii} con $i = 1, 2, 3$ los elementos del tensor de difusión rotacional y P_{23} y P_{32} los elementos no nulos del tensor de difusión de acoplamiento traslación rotación (García de la Torre y Bloomfield, 1981; Brenner, 1964).

A partir de la Ec.(2) podemos ver que la función de distribución orientacional es independiente del ángulo ϕ . Esto se debe a que el campo eléctrico induce una simetría cilíndrica en el sistema.

Sea f^0 la función de distribución orientacional en ausencia de campo eléctrico aplicado. Sabemos que tal función de distribución es constante porque al no haber dirección preferencial en el espacio todas las orientaciones son igualmente probables. Al aplicar un campo eléctrico sobre la solución la función de distribución cambia respecto del valor f^0 . En este trabajo supondremos que dicho cambio puede describirse adecuadamente adicionando a f^0 un término $f^E(\theta, \psi)$ que representa las modificaciones ocasionadas por el campo eléctrico, es decir

$$f(\theta, \psi) = f^0 + f^E(\theta, \psi) \quad (3)$$

Reemplazando la Ec.(3) en la Ec.(2) se obtiene

$$\left(D_{\theta\theta} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + D_{\psi\psi} \frac{\partial^2}{\partial \psi^2} + D_{\psi\theta} \frac{\partial^2}{\partial \psi \partial \theta} + D_{\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + D_{\psi} \frac{\partial}{\partial \psi} + D_{00} \right) f^E = -D_{00} f^0 \quad (4)$$

Para determinar la función de distribución debemos básicamente resolver la Ec.(4) para f^E . A tal fin, en el presente trabajo utilizamos el MDF (Collatz, 1966). Empezamos discretizando el dominio de las variables independientes θ y ψ , es decir, construimos una grilla de puntos discretos igualmente espaciados θ_l , ψ_m sobre el rango $0 \leq \theta \leq \pi$ y $0 \leq \psi \leq 2\pi$. Si denominamos n_{θ} y n_{ψ} al número de puntos discretos de la grilla según las direcciones θ y ψ respectivamente, cada punto interior de la grilla es generado por las

relaciones

$$\begin{aligned}\theta_l &= \theta_{l-1} + \Delta\theta & l &= 1, 2, \dots, n_\theta - 2 \\ \psi_m &= \psi_{m-1} + \Delta\psi & m &= 1, 2, \dots, n_\psi - 2\end{aligned}$$

con $\theta_0 = 0$, $\psi_0 = 0$, $\theta_{n_\theta-1} = \pi$ y $\psi_{n_\psi-1} = 2\pi$. Los espaciamentos entre puntos adyacentes de la grilla son $\Delta\theta = \pi/(n_\theta - 1)$ y $\Delta\psi = 2\pi/(n_\psi - 1)$

Las derivadas de la función f^E presentes en la Ec.(4) se reemplazan por expresiones aproximadas que se obtienen desarrollando la función en series de Taylor. Utilizando la aproximación de diferencia central se obtienen las siguientes aproximaciones para las derivadas de f^E

$$\left. \frac{\partial f^E}{\partial \theta} \right|_{l,m} \approx \frac{f_{l+1,m}^E - f_{l-1,m}^E}{2\Delta\theta}$$

$$\left. \frac{\partial f^E}{\partial \psi} \right|_{l,m} \approx \frac{f_{l,m+1}^E - f_{l,m-1}^E}{2\Delta\psi}$$

$$\left. \frac{\partial^2 f^E}{\partial \theta^2} \right|_{l,m} \approx \frac{f_{l+1,m}^E - 2f_{l,m}^E + f_{l-1,m}^E}{\Delta\theta^2}$$

$$\left. \frac{\partial^2 f^E}{\partial \psi^2} \right|_{l,m} \approx \frac{f_{l,m+1}^E - 2f_{l,m}^E + f_{l,m-1}^E}{\Delta\psi^2}$$

$$\left. \frac{\partial^2 f^E}{\partial \psi \partial \theta} \right|_{l,m} \approx \frac{1}{2\Delta\theta\Delta\psi} (f_{l+1,m+1}^E + f_{l-1,m-1}^E + 2f_{l,m}^E - f_{l+1,m}^E - f_{l-1,m}^E - f_{l,m+1}^E - f_{l,m-1}^E)$$

donde los subíndices i, j , con $i = l, l \pm 1$ y $j = m, m \pm 1$, que acompañan a f^E significan que la función debe evaluarse en el punto θ_i, ψ_j . Emplearemos esta nomenclatura en el resto del trabajo.

Utilizando estas aproximaciones para las derivadas, la Ec.(4) resulta

$$H_1 f_{l+1,m}^E + H_2 f_{l,m}^E + H_3 f_{l-1,m}^E + H_4 f_{l,m+1}^E + H_5 f_{l,m-1}^E + H_6 f_{l+1,m+1}^E + H_7 f_{l-1,m-1}^E = H_8 f^0 \quad (5)$$

donde

$$H_1 = \frac{D_{\theta\theta}}{\Delta\theta^2} - \frac{D_{\psi\theta}}{2\Delta\theta\Delta\psi} + \frac{D_\theta}{2\Delta\theta} \Big|_{l,m}$$

$$H_2 = -\frac{2D_{\theta\theta}}{\Delta\theta^2} - \frac{2D_{\psi\psi}}{\Delta\psi^2} + \frac{D_{\psi\theta}}{\Delta\theta\Delta\psi} + D_{00} \Big|_{l,m}$$

$$H_3 = \frac{D_{\theta\theta}}{\Delta\theta^2} - \frac{D_{\psi\theta}}{2\Delta\theta\Delta\psi} - \frac{D_\theta}{2\Delta\theta} \Big|_{l,m}$$

$$H_4 = \frac{D_{\psi\psi}}{\Delta\psi^2} - \frac{D_{\psi\theta}}{2\Delta\theta\Delta\psi} + \frac{D_\psi}{2\Delta\psi} \Big|_{l,m}$$

$$H_5 = \frac{D_{\psi\psi}}{\Delta\psi^2} - \frac{D_{\psi\theta}}{2\Delta\theta\Delta\psi} - \frac{D_\psi}{2\Delta\psi} \Big|_{l,m}$$

$$H_6 = \frac{D_{\psi\theta}}{2\Delta\theta\Delta\psi} \Big|_{l,m}$$

$$H_7 = H_6$$

$$H_8 = -D_{00} \Big|_{l,m}$$

Al variar l desde uno hasta $n_\theta - 2$ y m desde uno hasta $n_\psi - 2$, la Ec.(5) genera un conjunto de $(n_\theta - 2) \times (n_\psi - 2)$ ecuaciones lineales para los $n_\theta \times n_\psi$ valores que adopta la función f^E en los puntos de la grilla. El resto de las ecuaciones necesarias para tener un sistema constituido por igual número de ecuaciones que incógnitas se generan por las condiciones de contorno.

Observemos que la Ec.(1) es una ecuación de continuidad para la densidad de probabilidad. La expresión entre paréntesis presente en esta ecuación representa el vector corriente de probabilidad \mathbf{J} , en función del cual estableceremos parcialmente las condiciones de contorno. Realizando el cálculo correspondiente se puede demostrar que las componentes de \mathbf{J} según las direcciones θ y ψ vienen dadas, respectivamente, por

$$J_\theta(\theta, \psi) = \frac{E}{kT} \text{sen}\theta \cos\theta f^E \{ (a_{22} - a_{33}) E R_{11} \cos^2\psi \text{sen}\theta + \text{sen}\psi [-P_{23}q + (a_{11} - a_{33}) E R_{22} \text{sen}\theta \text{sen}\psi] + \text{sen}\theta \left[(R_{11} - R_{22}) \cos\psi \cot\theta \text{sen}\psi \frac{\partial f^E}{\partial \psi} - (R_{11} \cos^2\psi + R_{22} \text{sen}^2\psi) \frac{\partial f^E}{\partial \theta} \right] \}$$

$$J_\psi(\theta, \psi) = \frac{E}{kT} \text{sen}\theta \cos\psi f^E \{ -P_{23}q \cos\theta \cot\theta - E [(a_{22} - a_{33}) R_{11} + (a_{33} - a_{11}) R_{22}] \cos^2\theta \text{sen}\psi + \text{sen}\theta [P_{32}q + (a_{11} - a_{22}) E R_{33} \text{sen}\theta \text{sen}\psi] \} - \text{sen}\theta (R_{33} + R_{22} \cos^2\psi \cot^2\theta + R_{11} \cot^2\theta \text{sen}^2\psi) \frac{\partial f^E}{\partial \psi} + (R_{11} - R_{22}) \cos\theta \cos\psi \text{sen}\psi \frac{\partial f^E}{\partial \theta}$$

Las condiciones de contorno en θ están determinadas por la nulidad de la componente del vector corriente de probabilidad según esta misma dirección, es decir $J_\theta(\theta = 0, \psi) = 0$ y $J_\theta(\theta = \pi, \psi) = 0$. Empleando la aproximación de diferencia central para discretizar el flujo J_θ estas condiciones implican que

$$f_{0,m+1}^E - f_{0,m-1}^E = 0 \quad m = 0, 1, 2, \dots, n_\psi - 1 \quad (8)$$

$$f_{n_\theta-1,m+1}^E - f_{n_\theta-1,m-1}^E = 0 \quad m = 0, 1, 2, \dots, n_\psi - 1 \quad (9)$$

Observemos que en las dos últimas ecuaciones variamos m desde cero hasta $n_\psi - 1$. Esto significa que hemos de introducir puntos de la grilla que son ficticios, en el sentido que no pertenecen al dominio del problema. Los puntos ficticios corresponden a ensanchamientos de la grilla hacia puntos con coordenadas $\psi = \psi_0 - \Delta\psi$ y $\psi = \psi_{n_\psi-1} + \Delta\psi$ donde la función adopta valores $f_{l,-1}^E$ y f_{l,n_ψ}^E . Estos valores ficticios de f^E introducen $2n_\psi$ incógnitas adicionales a nuestro problema que serán descartadas luego de resolver el sistema de ecuaciones porque no tienen significado físico alguno.

Por otro lado, para la variable ψ tenemos condiciones de contorno periódicas debido a que los momentos \mathbf{M}_1 y $[M_2]$ son funciones periódicas en ψ con período 2π (Risken, 1989) Esto implica que $f^E(\theta, \psi = 0) = f^E(\theta, \psi = 2\pi)$ y $J_\psi(\theta, \psi = 0) = J_\psi(\theta, \psi = 2\pi)$ Dichas condiciones también pueden entenderse considerando que los ángulos $\psi = 0$ y $\psi = 2\pi$ corresponden a la misma orientación en el espacio. Aplicando la aproximación de diferencia central la periodicidad de f^E implica que

$$f_{l,0}^E - f_{l,n_\psi-1}^E = 0 \quad l = 0, 1, 2, \dots, n_\theta - 1 \quad (10)$$

Mientras que la periodicidad de J_ψ conduce a

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4\Delta\psi} [R_{22} + R_{33} + (R_{22} - R_{33})\cos(2\theta)] (f_{l,-1}^E - f_{l,1}^E - f_{l,n_\psi-2}^E + f_{l,n_\psi}^E) \\ & + \frac{E q}{k T} (-P_{23} \cos^2 \theta + P_{32} \sin^2 \theta) \sin \theta (f_{l,0}^E - f_{l,n_\psi-1}^E) = 0 \quad l = 0, 1, 2, \dots, n_\theta - 1 \end{aligned} \quad (11)$$

Notemos que al expandir la grilla e incorporar los puntos ficticios, la Ec.(5) aporta ahora $(n_\theta - 2) \times n_\psi$ ecuaciones que se generan haciendo $l = 1, 2, \dots, n_\theta - 2$ y $m = 0, 1, 2, \dots, n_\psi - 1$. Nuestro problema se reduce entonces a resolver el conjunto de $n_\theta \times (n_\psi + 2)$ ecuaciones generadas por las Ec.(5) y Ec.(8-11) con $n_\theta \times (n_\psi + 2)$ incógnitas constituidas por los valores $f_{l,m}^E$ que adopta la función en los puntos de la grilla (incluidos los puntos ficticios).

Finalmente, la función de distribución orientacional que se obtiene debe normalizarse para que la probabilidad de encontrar una partícula en cualquier orientación sea igual a uno; es decir

$$f_N(\theta, \psi) = \frac{f^0 + f^E(\theta, \psi)}{2\pi \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (f^0 + f^E) \sin \theta d\theta d\psi} \quad (12)$$

donde $f_N(\theta, \psi)$ representa la función de distribución orientacional normalizada.

La integral presente en la Ec.(12) se resuelve numéricamente utilizando la regla del trapecio.

Dado que el valor de f^0 está definido a excepción de una constante de normalización, al momento de realizar los cálculos elegimos arbitrariamente $f^0 = 1$.

3 RESULTADOS

Todos los cálculos se realizaron empleando el software MATLAB 7.5.0.

El número de puntos de la grilla utilizado en este trabajo es $n_\theta = 60$ y $n_\psi = 60$ para las variables independientes θ y ψ , respectivamente. Los parámetros eléctricos e hidrodinámicos utilizados son característicos de fragmentos de ADN de 600 Å de longitud de arco.

Las figuras 1-3 muestran la función de distribución orientacional obtenida con el MDF para un rango amplio de intensidades de campo eléctrico. La Figura 1 muestra, a su vez, la función de distribución calculada con el MP desarrollado por Bertolotto et. al. (2004) para $E = 1 \text{KV/cm}$. La mayor diferencia entre ambas soluciones es de 0.3 %, aproximadamente. Este valor corresponde a los ángulos $\theta = \pi/4, 3\pi/4$ y es prácticamente independiente del ángulo ψ . Para $E = 10 \text{KV/cm}$ y $E = 20 \text{KV/cm}$ sólo se muestran los resultados del MDF dado que los del MP son completamente inexactos llegando incluso a dar resultados negativos.

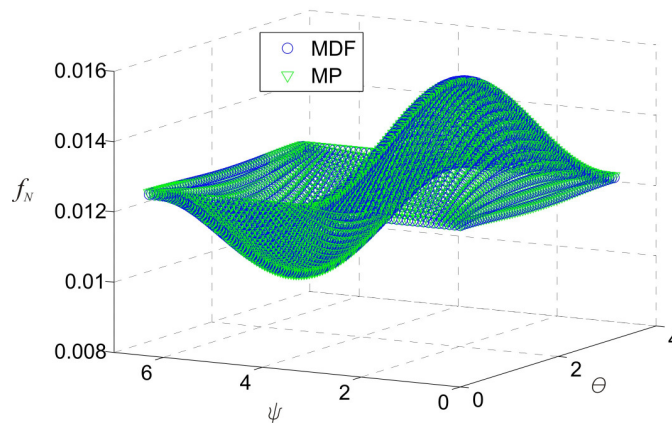


Figura 1: Función de distribución para $E = 1 \text{KV/cm}$ calculada con el MDF (\circ) y con el MP (∇)

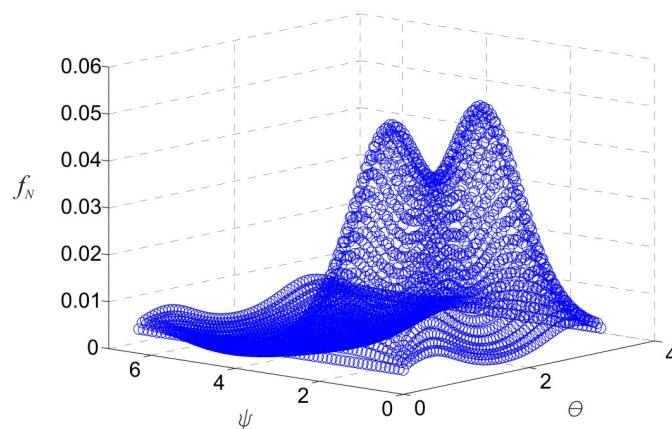


Figura 2: Función de distribución para $E = 10 \text{KV/cm}$ calculada con el MDF

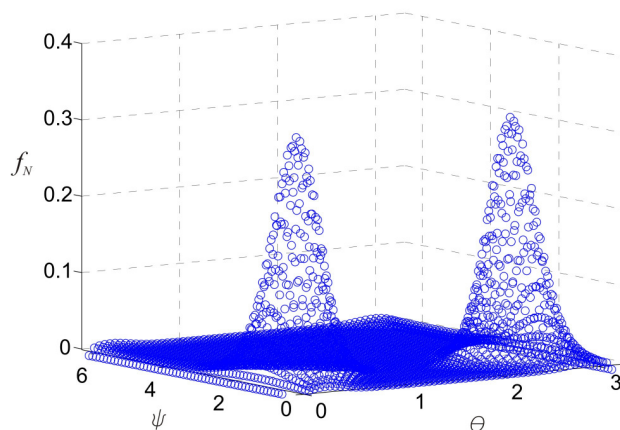


Figura 3: Función de distribución para $E = 20 \text{ KV/cm}$ calculada con el MDF

A fin de estimar el error cometido con el MDF hacemos $q = 0$. En este caso particular la solución exacta de la ecuación de Fokker-Planck para el estado estacionario es la función de distribución de Boltzmann (FDB). Las figuras 4, 5 y 6 muestran la solución exacta y la obtenida mediante el MDF para diferentes intensidades del campo eléctrico aplicado. Al comparar con la solución exacta se observa que el error relativo varia con los ángulos θ y ψ . El error relativo máximo para un campo eléctrico dado es mayor cuando mayor es la intensidad del campo. Considerando las regiones del dominio donde la función de distribución es distinta de cero, que es donde contribuye a los cálculos estadísticos, el error relativo máximo es 0.025 % para $E = 1 \text{ KV/cm}$, 2.5 % para $E = 10 \text{ KV/cm}$ y 20 % para $E = 20 \text{ KV/cm}$, aproximadamente.

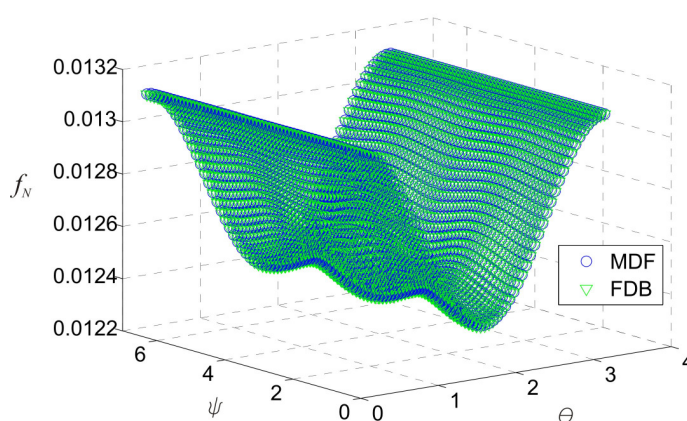


Figura 4: Función de distribución para $E = 1 \text{ KV/cm}$ y $q = 0$ calculada con el MDF (\bar{f}) y con la distribución de Boltzmann (J)

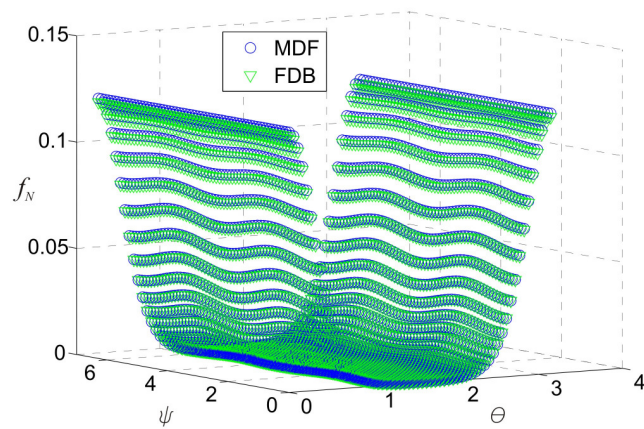


Figura 5: Función de distribución para $E = 10 \text{ KV/cm}$ y $q = 0$ calculada con el MDF (\bar{f}) y con la distribución de Boltzmann (J)

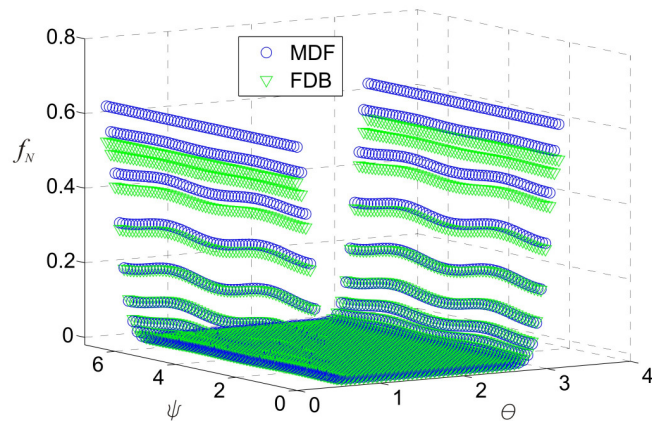


Figura 6: Función de distribución para $E = 20 \text{ KV/cm}$ y $q = 0$ calculada con el MDF (\bar{f}) y con la distribución de Boltzmann (J)

3 CONCLUSIONES

Mediante el MDF es posible resolver la ecuación de Fokker-Planck para calcular la función de distribución orientacional de moléculas de ADN en presencia de un campo eléctrico externo de intensidad arbitraria en el estado estacionario.

El error relativo del cálculo realizado con el MDF depende del campo eléctrico aplicado. Para campos eléctricos de intensidades menores o iguales a 10 KV/cm el error relativo es menor o igual a 2.5 %. Para intensidades mayores el resultado es cualitativamente correcto, pero se observa la necesidad de incrementar el número de puntos de la grilla para disminuir el error relativo que alcanza el 20 % para $E = 20 \text{ KV/cm}$. Actualmente, se está trabajando con éste objetivo.

REFERENCIAS

- Bertolotto, J. A., Roston, G. B., and Ascheri, M. E., Electro-optical properties of DNA. *Progress in Colloids and Polymer Science*, 128:25–29, 2004.
- Bertolotto, J. A., Electric birefringence and dichroism of DNA fragments in aqueous solution. *Physica A*, 373:29–42, 2007.
- Brenner, H., The Stokes resistance of an arbitrary particle—II: An extension. *Chemical Engineering Science*, 19:599–629, 1964.
- Chang, J. S., Cooper, G., A practical difference scheme for Fokker-Planck equations. *Journal of Computational Physics*, 6:1–16, 1970.
- Collatz, L., *The numerical treatment of differential equations*. Springer-Verlag, 1966.
- Fredericq, E., and Houssier, C., *Electric and dichroism and electric birefringence*. Claredon Press, 1973.
- García de la Torre, J., and Bloomfield, V. A., Hydrodynamic properties of complex rigid biological macromolecules: theory and applications. *Quarterly Reviews of Biophysics*, 14:81–139, 1981.
- Risken, H., *The Fokker-Planck equation*. 2^a ed. Springer, 1989.