Eficiencia a máxima potencia de una máquina térmica browniana

O. Contreras-Vergara¹, G. Valencia-Ortega² N. Sánchez-Salas¹ J. I. Jiménez-Aquino³.

¹ Departamento de Física, Escuela Superior de Física y Matemáticas, Instituto Politécnico Nacional. Edif. 9 UP Zacatenco, CP 07738, CDMX, México.

² División de Matemáticas e Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México-FES Acatlán, C.P. 53150, Edo. de Mex., México.

³ Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana–Iztapalapa, C.P. 09340, CDMX, México.

E-mail: ocontrerasv1300@alumno.ipn.mx; gvalenciao1600@alumno.ipn.mx, nsanchezs@ipn.mx, ines@xanum.uan.mx

Resumen — Se estudia el desempeño de una máquina térmica estocástica en el régimen de máxima potencia. La máquina opera con una partícula Browniana atrapada en un potencial armónico realizando un ciclo tipo Carnot, con dos isotermas y dos ramas tipo adiabáticas. El sistema se describe con dinámica estocástica partiendo de la ecuación de Langevin, a continuación se aplica una estrategia para obtener una expresión determinista para el desplazamiento cuadrático promedio con la que es posible encontrar el calor (promedio) y trabajo (promedio) en cada proceso del ciclo. Finalmente, se aplica consideraciones de baja disipación, propuesto originalmente para máquinas macroscópicas, y se obtiene la eficiencia del ciclo a máxima potencia.

Palabras Clave – Ciclo tipo Carnot, régimen de máxima potencia, ecuación de Langevin, baja disipación, potencial armónico, partícula Browniana.

Abstract — The performance of a stochastic thermal engine at maximum power regime is studied. The engine operates with a Brownian particle trapped in a harmonic potential performing a Carnot-type cycle, with two isotherms and two adiabatic-type branches. The system is described by stochastic dynamics starting from the Langevin equation, then a strategy is applied to obtain a deterministic expression for the average quadratic displacement with which it is possible to find the heat (average) and work (average) in each process cycle. Finally, low dissipation consideration, originally proposed for macroscopic machines, is applied, and the efficiency of the cycle at maximum power is obtained.

Keywords — Carnot-like cycle, maximum power regime, Langevin equation, low disipation, harmonic potential, Brownian particle.

I. INTRODUCCIÓN

Los recientes descubrimientos que se han podido alcanzar en la micro y nanotecnología, consisten en la construcción de dispositivos mesoscópicos parecidos a las máquinas térmicas macroscópicas. Su principal característica yace en extraer energía de sus alrededores (baño térmico) y

Este trabajo está patrocinado en parte por la Secretaría de Investigación y Posgrado del IPN, proyecto SIP-XXX-08

convertirlo en trabajo útil. Así, el desempeño que este tipo de dispositivos Brownianos pueden desarrollar depende de las

fluctuaciones del medio que los rodean [1]. Este tipo de máquinas térmicas estocásticas consiste en partículas coloidales atrapadas en pinzas ópticas, que pueden manipularse externamente. Por lo tanto, estos motores térmicos mesoscópicos pueden modularse para que operen en ciclos; en particular el que consiste de dos procesos isotérmicos y dos procesos adiabáticos (ciclo de Carnot). En este estudio centramos nuestra atención en describir el desempeño energético de estos motores térmicos por medio de su potencia y eficiencia. Es decir, aprovechamos que su dinámica mesoscópica está bien definida, siempre y cuando se construya un ensamble sobre una simple trayectoria estocástica que puede experimentar una partícula coloidal [2].

De acuerdo con el esquema de la energética estocástica [3], el intercambio de calor de la partícula con el baño, así como el trabajo obtenido durante el ciclo, pueden obtenerse a lo largo de una trayectoria, siempre que se tome en cuenta la forma específica del protocolo $\kappa(t)$ [4-7]. Sin embargo, aquí se plantea dicha descripción desde el punto de vista del modelo de baja disipación reportado en [8], en el cual se considera que, en cada proceso del ciclo, la partícula atraviesa una sucesión de estados de equilibrio de carácter reversible; No obstante, se pueden considerar irreversibilidades (producción de entropía) en el mismo diseño termodinámico; así, el calor y el trabajo se modifican y contemplan estas irreversibilidades. En este modelo se tomará en cuenta que la ecuación de estado estará asociada a una ecuación determinista, proveniente de una ecuación de Langevin. Por medio de un esquema de convertidor de energía de baja disipación (Low Dissipation), encontramos los tiempos de contactó óptimos, que en estas máquinas Brownianas se traducen en los tiempos de amplitud para controlar las fluctuaciones en el baño térmico, que corresponden al llamado régimen de máxima potencia [8,9].

II. METODOLOGÍA

Considere una partícula Browniana inmersa en un baño de temperatura T y que se encuentra bajo la influencia de un potencial armónico de rigidez $\kappa(t)$. La ecuación de Langevin que rige a este sistema viene dada por

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -\alpha\frac{dx}{dt} - \kappa(t)x + \xi(t).$$
(1)

La cual, en el régimen sobreamortiguado vienen dada por

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

Esta ecuación, conocida en teoría de procesos estocásticos como proceso de Ornstein-Uhlenbeck, puede convertirse en una ecuación de determinista pare el promedio $\langle x^2(t) \rangle$ si se utiliza la estrategia de Langevin formulada en 1908, y estudiada con más detalle en [10]. La ecuación determinista se obtiene de la siguiente manera: se multiplica la ec. (2) por x, y se toma el promedio del ensamble, obteniéndose la ecuación

$$\alpha \frac{d\langle x^2 \rangle}{dt} = -2\kappa(t)\langle x^2 \rangle + 2\langle x\xi(t) \rangle \tag{3}$$

Al asumir que la función de correlación $\langle x(t)\xi(t)\rangle$ es una constante *C*, obtenemos entonces

$$\alpha \frac{d\langle x^2 \rangle}{dt} = -2\kappa(t)\langle x^2 \rangle + 2C \tag{4}$$

Esta constante se puede determinar en el estado de equilibrio estacionario, puesto que el proceso (1) es estacionario. En este caso, se puede mostrar fácilmente que $C = k_{\rm B}T$, luego entonces la función de correlación $\langle x(t)\xi(t)\rangle = k_{B}T$, que da cuenta de la interacción entre la variable dinámica *x* con el baño térmico es proporcional a la energía térmica y por tanto la ecuación determinista antes mencionada será

$$\alpha \frac{d\langle x^2 \rangle}{dt} = -2\kappa(t)\langle x^2 \rangle + 2k_B T \tag{5}$$

Por lo anterior podemos suponer que en general la función de correlación $\langle x(t)\xi(t)\rangle = k_B T(t)$, donde la temperatura depende del tiempo, y de esta manera la ecuación determinista que describe la dinámica de partícula browniana se puede escribir como

$$\alpha \frac{d\langle x^2 \rangle}{dt} = -2\kappa(t)\langle x^2 \rangle + 2k_B T(t) \tag{6}$$

De igual manera, en el estado de equilibrio estacionario $\langle x^2 \rangle st = k_B T/\kappa$, que se tomará como una ecuación tipoecuación de estado y será el punto de partida del modelo de baja disipación.

A. Descripción cuasiestática de máquinas térmicas estocásticas.

Siguiendo un proceso de caracterización similar al del gas ideal se propone un punto de estado para la partícula, el cual depende de $\langle x^2 \rangle$, κ y *T*; en este mismo sentido, la energía total promedio del sistema $\langle E \rangle = E$ viene dada por

$$E = \frac{1}{2}\kappa \langle x^2 \rangle + \frac{1}{2}k_B T \tag{6}$$

Y en el equilibrio es $E_{eq} = k_B T$. De acuerdo con [3] el trabajo y el calor promedio entre dos estados de equilibrio A y B viene dado por

$$W_{AB} = \frac{1}{2} \int_{A}^{B} \langle x^2 \rangle \, d\kappa \tag{7}$$

$$Q_{AB} = \frac{1}{2} \int_{A}^{B} \kappa d\langle x^{2} \rangle + \frac{1}{2} k_{B} (T_{B} - T_{A})$$
(8)

Por otro lado la energía libre de la partícula puede ser obtenida a partir de la siguiente función de partición

$$Z(\kappa,T) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta\kappa x^2}{2}} dx = \sqrt{\frac{2\pi k_B T}{\kappa}}$$
(9)

Luego, la energía libre de Helmholtz es

$$F(\kappa,T) = -k_B T \ln[Z(\kappa,T)] = -k_B T ln\left(\sqrt{\frac{2\pi k_B T}{\kappa}}\right) (10)$$

De manera correspondiente al caso del gas ideal, se tiene que $dF = -SdT + \Phi d\kappa$, donde la entropía es

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{\kappa} = \frac{k_B}{2} \left[\ln\left(\frac{2\pi k_B T}{\kappa}\right) + 1 \right], \tag{11}$$

Mientras que Φ satisface la siguiente ecuación de estado

$$\Phi = \left(\frac{\partial F}{\partial \kappa}\right)_T = \frac{k_B T}{2\kappa} = \frac{\langle x^2 \rangle}{2}.$$
 (12)

En este nuevo marco, la rigidez del sistema toma el rol del inverso del volumen efectivo en comparación con el caso del gas ideal, mientras que Φ es un parámetro asociado a la varianza de las realizaciones de la partícula en las trayectorias, y que a su vez puede ser equiparado con la función que desempeña el parámetro de presión en el gas ideal; además, de la condición adiabática se obtiene que $\kappa = const * T$. Una vez establecidos estos parámetros, es posible llevar a cabo el estudio del desempeño de este sistema a partir de su eficiencia, la cual se halla restringida por la segunda ley de la termodinámica [11-13], esto es

$$\eta = \frac{\langle W \rangle}{\langle Q_h \rangle} \le \eta_C, \tag{13}$$

A esta escala, la implementación de un ciclo de Carnot involucra la modificación de la rigidez, así como de la temperatura entre los diversos estados de equilibrio. Tal y como puede verse de la Fig. 1, el ciclo consta de dos procesos isotérmicos y dos procesos adiabáticos, a lo largo de los cuales se describe la energética del sistema de la siguiente manera:

i) "Expansión" isotérmica $(A \rightarrow B)$: durante este proceso el valor de la rigidez de la trampa disminuye desde κ_1 hasta κ_2 $(\kappa_2 < \kappa_1)$ con $T_h = const$. Además el cambio de energía $(\Delta E)_{AB} = 0$ y $Q_{AB} = -W_{AB}$,



Fig. 1. Diagrama de un ciclo tipo Carnot para una partícula Browniana atrapada en un potencial armónico. i) "expansión isotérmica" $(A \rightarrow B)$. ii) expansión adiabática $(B \rightarrow C)$. iii) "compresión isotérmica" $(C \rightarrow D)$. iv) "compresión adiabática" $(D \rightarrow A)$.

$$W_{AB} = \frac{k_B T_h}{2} \int_{\kappa_1}^{\kappa_2} \frac{d\kappa}{\kappa} = \frac{k_B T_h}{2} \ln\left(\frac{\kappa_2}{\kappa_1}\right) < 0, \quad (14)$$

$$Q_{AB} = -\frac{k_B T_h}{2} \ln\left(\frac{\kappa_2}{\kappa_1}\right) = \frac{k_B T_h}{2} \ln\left(\frac{\kappa_1}{\kappa_2}\right) < 0.$$
(15)

ii) Expansión adiabática $(B \rightarrow C)$: Durante este proceso que va de $\kappa_2 \rightarrow \kappa_3$, $(\kappa_3 < \kappa_2)$, el sistema realiza trabajo, además la temperatura va de $T_h \rightarrow T_c$, así

$$W_{BC} = (\Delta E)_{BC} = k_B (T_h - T_c).$$
 (16)

iii) "Compresión" Isotérmica $(C \rightarrow D)$: Durante este proceso las fluctuaciones térmicas del sistema disminuyen hasta una temperatura T_c que se mantiene constante. Además se cumple que $Q_{CD} = -W_{CD}$, luego

$$W_{CD} = \frac{k_B T_C}{2} \int_{\kappa_3}^{\kappa_4} \frac{d\kappa}{\kappa} = \frac{k_B T_C}{2} \ln\left(\frac{\kappa_4}{\kappa_3}\right) > 0 \qquad (17)$$

$$Q_{CD} = -\frac{k_B T_C}{2} \ln\left(\frac{\kappa_4}{\kappa_3}\right) < 0 \tag{18}$$

iv) "Compresión" adiabática $(D \rightarrow A)$: Durante este último proceso en el que la rigidez de la trampa va de $\kappa_4 \rightarrow \kappa_1$ con $(\kappa_1 > \kappa_4)$ se puede extraer trabajo al sistema, además la temperatura va de T_c a T_h .

$$W_{DA} = (\Delta E)_{DA} = k_B (T_h - T_c).$$
 (19)

El trabajo total presentado por este ciclo termodinámico es la suma $W_{tot} = W_{AB} + W_{BC} + W_{CD} + W_{DA}$, luego, la eficiencia del sistema es

$$\eta = \frac{W_{tot}}{Q_{in}} = \frac{\frac{k_B}{2} \left[T_h \ln\left(\frac{\kappa_1}{\kappa_2}\right) - T_c \ln\left(\frac{\kappa_4}{\kappa_3}\right) \right]}{\frac{k_B}{2} T_h \ln\left(\frac{\kappa_1}{\kappa_2}\right)} \tag{20}$$

Donde $Q_{in} = Q_{AB}$. De la ecuación del proceso adiabático se sigue que

$$\frac{\kappa_2}{T_h} = \frac{\kappa_3}{T_c}, \qquad \frac{\kappa_1}{T_h} = \frac{\kappa_4}{T_c}, \quad \rightarrow \quad \frac{\kappa_4}{\kappa_3} = \frac{\kappa_1}{\kappa_2}$$
(21)

Y por lo tanto la eficiencia de un ciclo tipo Carnot es

$$\eta_{C} = \frac{T_{h} - T_{C}}{T_{h}} = 1 - \frac{T_{C}}{T_{h}},$$
(22)

Lo cual es idéntico al caso macroscópico del ciclo.

B. Condición de baja disipación

Una vez que se ha examinado el caso cuasiestático del ciclo a escala mesoscópica se procede a realizar el mismo análisis, solo que ahora, se hará desde una perspectiva fuera de equilibrio, es decir, considerando irreversibilidades en un sistema cíclico de tiempo finito. En este nuevo esquema el tiempo de duración del ciclo es τ , mientras que el trabajo extraído a esta máquina será $\langle W \rangle = \langle W_{\infty} \rangle + \langle W_{dis} \rangle$, que como ya se hizo mención en la sección anterior es la suma del trabajo promedio del ciclo cuasiestático más el trabajo disipado por ciclo; también, durante este ciclo el calor considera disipaciones $\langle Q \rangle = \langle Q_{\infty} \rangle - \frac{T\Sigma}{\tau}$, donde el término Σ representa las irreversibilidades internas que surgen como consecuencia del acoplamiento entre la partícula y el baño. Luego entonces, a partir de estas consideraciones y de la ecuación dinámica (5) se describe el proceso de conversión de energía en el régimen de baja disipación. Considere dos tiempos característicos τ_1 y τ_2 los cuales corresponden al tiempo de duración de las amplitudes de fluctuaciones bajas y altas respectivamente, por lo que el intercambio de calor en cada proceso viene determinado por

$$Q_1 = T_c \left(-\Delta S - \frac{\Sigma_1}{\tau_1} \right), \tag{23}$$

$$Q_2 = T_h \left(\Delta S - \frac{\Sigma_2}{\tau_2} \right). \tag{24}$$

Si $T_h\Delta S = Q_{AB}$ y $T_c\Delta S = Q_{CD}$, entonces la potencia de salida de este ciclo de Carnot Browniano está dada por

$$P \equiv \frac{-W}{\tau} = \frac{(T_h - T_c)\Delta S - \left(\frac{T_c\Sigma_1}{\tau_1} + \frac{T_h\Sigma_2}{\tau_2}\right)}{\tau_1 + \tau_2}$$
$$= \frac{\frac{k_B}{2}(T_h - T_c)\ln\left(\frac{\kappa_1}{\kappa_2}\right) - \left(\frac{T_c\Sigma_1}{\tau_1} + \frac{T_h\Sigma_2}{\tau_2}\right)}{\tau_1 + \tau_2}$$
(25)

En el régimen de máxima potencia esta expresión conduce a los siguientes valores de τ_1 y τ_2

$$\tau_1^* = \frac{2T_c \Sigma_1}{(T_h - T_c) \Delta S} \left(1 + \sqrt{\frac{T_h \Sigma_2}{T_c \Sigma_1}} \right)$$
(26)

$$\tau_2^* = \frac{2T_h \Sigma_2}{(T_h - T_c) \Delta S} \left(1 + \sqrt{\frac{T_c \Sigma_1}{T_h \Sigma_2}} \right)$$
(27)

En este régimen la eficiencia del ciclo es

$$\gamma_{MP} = \frac{(T_h - T_c) \left(1 + \sqrt{\frac{T_C \Sigma_1}{T_h \Sigma_2}} \right)}{T_h \left(1 + \sqrt{\frac{T_C \Sigma_1}{T_h \Sigma_2}} \right)^2 + T_c \left(1 - \frac{\Sigma_1}{\Sigma_2} \right)}$$
(28)

Con lo que se ha obtenido una expresión para la eficiencia en el régimen de máxima potencia considerando el modelo de baja disipación.

III. RESULTADOS

De la última expresión obtenida en la sección anterior se puede apreciar que en el caso en que se tiene una disipación simétrica se puede recuperar la eficiencia de Curzon-Ahlborn [14]. Es decir, en el momento en que $\Sigma_1 = \Sigma_2$ se tiene que



Fig. 2. Representación $\eta vs \theta$, con $\theta = \frac{T_c}{T_h}$, de la región de operación en un ciclo de Carnot irreversible. La línea sólida representa la eficiencia de Curzon-Alborn, mientras que las líneas punteadas representan las cotas de la región. El punto en color azul muestra el desempeño de un ciclo de Carnot Browniano reportado en [15]

Por otro lado, al considerar el caso de disipación asimétrica $\left(\frac{\Sigma_1}{\Sigma_2}\right) \rightarrow 0$ entonces el valor de η_{MP} queda acotado superiormente por $\eta_{MP}^S = \eta_C/(2 - \eta_C)$. Por otro lado, si

 $\left(\frac{\Sigma_1}{\Sigma_2}\right) \rightarrow \infty$ habrá una cota inferior $\eta_{MP}^- = \eta_C/2$. La Fig. 2 muestra la región de operación de este modelo en su aproximación al régimen de baja disipación. El punto en color azul marcado en la gráfica representa el valor de la eficiencia para el ciclo de Carnot Browniano reportado en [15], el valor aquí mostrado se halla dentro de la región de operación, con lo que el modelo planteado se ajusta de manera adecuada a este caso.

IV. DISCUSIÓN

Con base en la consistencia que muestra este modelo respecto al planteado en [15], Queda abierta la pregunta sobre: si este modelo puede ser aplicado a otro tipo de procesos cíclicos como los de Stirling y Ericksson, y cuyos resultados puedan ser comparados con la literatura [16]. No obstante, el planteamiento de cada uno de éstos conllevaría a una forma distinta de abordarlos, ya que debido a su estructura sería necesario considerar algunos efectos adicionales o diferentes al caso del ciclo de Carnot.

V. CONCLUSIONES

Se ha llevado a cabo un estudio teórico aproximado del desempeño de una máquina térmica Browniana fuera de equilibrio en un ciclo tipo Carnot, tomando como punto de partida una ecuación diferencial asociada al desplazamiento cuadrático promedio así como las propiedades térmicas del sistema. Este proceso se ha analizado utilizando el modelo de baja disipación en dos regímenes diferentes: el primero, bajo condiciones reversibles simulando un proceso promedio a lo largo de una trayectoria determinista en el que se ha definido una ecuación de estado similar a la del gas ideal, obteniendo con ello una expresión para la eficiencia de esta máquina mesoscópica. Por su parte, en el segundo esquema, el modelo desarrolla a tiempo finito, aquí las propiedades se termodinámicas del sistema dependen en gran medida del protocolo $\kappa(t)$, por lo que para determinar dichas propiedades se debe de conocer a detalle $\kappa(t)$. Sin embargo, cuando se considera una rigidez en general es posible obtener una expresión para la eficiencia a máxima potencia siempre v cuando el calor y el trabajo sean irreversibles y consideren bajas disipaciones. Lo anterior a paso a que se tomen en cuenta ciertos efectos provenientes de las irreversibilidades, parte de ellos provenientes del protocolo dependiente del tiempo. En este modelo tipo Carnot la eficiencia aquí obtenida es igual a la reportada en [8] para el caso macroscópico. Además, para el caso en el que $\Sigma_1 = \Sigma_2$ se recupera la expresión de la eficiencia de Curzon-Ahlborn, mientras que los límites en los que la disipación es simétrica, definen la región de operación energética de este modelo.

AGRADECIMIENTOS

O.C.V. Agradece a CONACyT el apoyo brindado para la realización de este trabajo.

REFERENCIAS

- I. A. Martinez, E. Roldán, J. M. R. Parrondo, and D. Petrov. "Effective heating to several thousand kelvins of an optically trapped sphere in a liquid". Physical Review E, vol. 87, no. 3, p. 032159, 2013.
- [2] A. Ashkin, J. M. Dziedzic, and T. Yamane. "Optical trapping and manipulation of single cells using infrared laser beams". Nature, vol. 330, no. 6150, p.p. 769–771, 1987.
- [3] K. Sekimoto. Stochastic energetics, vol.799. Springer, 2010.
- [4] Y. Tu and Y. Cao. "Design principles and optimal performance for molecular motors under realistic constraints". Phys. Rev. E, vol. 97, p. 022403, 2018.
- [5] C. A. Plata, D. Gu'ery-Odelin, E. Trizac, and A. Prados. "Optimal work in a harmonic trap with bounded stiffness". Physical Review E, vol. 99, no. 1, p. 012140, 2019.
- [6] T. Schmiedl and U. Seifert. "Efficiency of molecular motors at maximum power". EPL (Euro-physics Letters), vol. 83, no.3, p. 30005, 2008.
- [7] S. Rana, P. S. Pal, A. Saha, and A. M. Jayannavar. "Single-particle stochastic heat engine". Physical review E, vol. 90, no. 4, p. 042146, 2014.
- [8] M. Esposito, R. Kawai, K. Lindenberg, and C. Van den Broeck. "Efficiency at maximum power of low-dissipation Carnot engines". Phys. Rev. Lett., vol. 105, no. 15, p. 150603, 2010.
- [9] J. González-Ayala, J. M. M. Roco, A. Medina, and A. Calvo Hernández. "Carnot-like heat engines versus low-dissipation models". Entropy, vol. 19, no. 4, p. 182, 2017.
- [10] O. Contreras-Vergara, N. Lucero-Azuara, N. Sánchez-Salas, and J. I. Jiménez-Aquino. "Langevin original approach and ornstein– uhlenbeck-type processes". Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, vol. 584, p. 126349, 2021.
- [11] T. R. Gingrich, G. M. Rotskoff, G. E. Crooks, and P. L. Geissler. "Nearoptimal protocols in complex nonequilibrium transformations". Proceedings of the National Academy of Sciences, vol. 113, no. 37, p.p. 10263–10268, 2001.
- [12] K. Sekimoto, F. Takagi, and T. Hondou. "Carnots cycle for small systems: Irreversibility and cost of operations". Phys. Rev. E, vol. 62, no. 6, p. 7759, 2000.
- [13] T. Schmiedl and U. Seifert. "Optimal finite-time processes in stochastic thermodynamics". Phys. Rev. Lett., vol. 98, no. 10, p. 108301, 2007.
- [14] F. L. Curzon and B. Ahlborn. "Efficiency of a carnot engine at maximum power output". A. J. P., vol. 43, no. 1, p.p. 22–24, 1975.
- [15] I. A. Martínez, E. Roldán, L. Dinis, D. Petrov, J. M. Parrondo, and R. A. Rica. "Brownian Carnot engine". Nature physics, vol. 12, p.p. 67– 70, 201.
- [16] V. Blickle and C. Bechinger. "Realization of a micrometre-sized stochastic heat engine". Nature Physics, vol. 8, no. 2, p.p. 143–146, 2001.