



Universidad Autónoma Metropolitana
Unidad Iztapalapa

División de Ciencias Básicas e Ingeniería
Licenciatura en física.

PROYECTO TERMINAL 2

Análisis de ecuaciones de difusión con reinicio II.

ALUMNO:

Alfredo Montiel Suaste

ASESOR:

Leonardo Dagdug Lima

Ciudad de México, 4 febrero de 2022

Alfredo Montiel Suaste

Leonardo Dagdug Lima

Proyecto terminal 1 y 2: Análisis de ecuaciones de difusión con reinicio

Alumno: Alfredo Montiel Suaste

Asesor: Leonardo Dagdug Lima

Universidad Autónoma Metropolitana, unidad Iztapalapa
Ciudad de México

Resumen

La ecuación de difusión es una herramienta que permite describir el comportamiento de múltiples sistemas físicos y biológicos, adicionalmente, la ecuación de difusión puede ser modificada para describir fenómenos aun más complejos, y esa es la razón del presente trabajo, que tiene la motivación de mostrar el funcionamiento de un proceso donde una partícula que difunde libremente a través de un medio sufre de forma súbita un cambio de posición a una en específico donde posteriormente vuelve a difundir libremente y eventualmente repetir el proceso. Este comportamiento recibe el nombre de difusión con reinicio, proceso que se utiliza para modelar variedad de sistemas biológicos de mucha importancia en el mundo.

Un ejemplo perfecto son los procesos de búsqueda, procesos que son realizados por todas las especies animales y vegetales del planeta, sea en el ámbito de alimentación, recolocación y/o apareamiento. Los métodos que normalmente utilizan (que aunque distintos según la especie) tienen como punto común la repetición de ya sean trayectorias, estrategias, conductas etc. De forma que el volver a una posición inicial (en diferentes contextos) siempre ocurre.

1. Introducción

Antes de hablar de difusión reinicio es necesario hablar de difusión, con esto se puede modelar (y viceversa) al movimiento Browniano, llamado así por el botánico Irlandés Robert Brown (1773-1858) en 1827, dicho movimiento consistía en el movimiento azaroso de partículas de polen en un fluido, con lo que concluyó que se trataba de un fenómeno estrictamente físico.

Posteriormente el movimiento browniano fue estudiado por múltiples científicos, cada uno de ellos proponiendo explicaciones para el fenómeno, no fue hasta 1900 que Marian Ritten von Smolan Smoluchowski (1872-1917) dio una explicación cualitativa y cuantitativa del movimiento browniano basándose en la teoría cinética de los gases. Paralelamente Albert Einstein (1879-1955) logra dar una explicación completa al movimiento browniano, modelándolo como un proceso estocástico, demostrando también que el proceso puede ser modelado con la ecuación de difusión.

La ecuación de difusión fue modelada a partir de argumentos heurísticos en 1855 por Adolf Fick (1829-1901),

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x, t) = D\nabla^2u(x, t) \quad (1.1)$$

donde D es la constante de difusión y u representa la concentración de partículas brownianas por unidad de volumen.

Tiempo después en 1908 Paul Langevin (1872-1946) publica una descripción de macroscópica del movimiento browniano, usando para ello la segunda Ley de Newton, donde Langevin modelo que las fuerzas responsables de el movimiento eran dos, una consistía en las colisiones de las partículas con las moléculas del fluido y la segunda fuerza debida a la viscosidad del fluido, dando como resultado a la ecuación de Langevin,

$$m\frac{d}{dt}x = -m\gamma\frac{d}{dt}x + f(t) \quad (1.2)$$

donde $f(t)$ es una fuerza estocástica, misma que permite la formulación de la dinámica de una partícula browniana sin perdida de generalidad. Dando así una forma alternativa de describir al

movimiento de una partícula browniana además de unas cuantas propiedades de la misma.

Cabe agregar que la ecuación de difusión no solo ayuda a explicar el movimiento browniano o los procesos de transferencia de masa, también pueden describir procesos termodinámicos variados, dando lugar así a la ecuación de difusión de calor, la ecuación de difusión-reacción y de difusión-convección. Las cuales son modificaciones muy simples a la ecuación de difusión y sorprendentemente dichas ecuaciones son capaces de describir una gran variedad de fenómenos que ocurren en múltiples campos de la ciencia.

Un ejemplo de esto son los de procesos de búsqueda/arribo, dichos procesos se estudian con la ecuación de difusión y más aun, pueden optimizarse mediante la modificación de la misma. Una de esas modificaciones es el “reinicio”, dicha propiedad consiste en que una partícula browniana (o el ente que pueda ser descrito mediante la ecuación de difusión) vuelva a una posición en concreto y vuelva a difundir como si fuera la primera vez, esto múltiples veces en un intervalo de tiempo, con esto la difusión con reinicio ayuda a modelar ciertos procesos que ocurren en la naturaleza desde escala microscópica hasta la macroscópica, tales como migraciones, la búsqueda de comida que llevan a cabo los animales, las rutas de polinización de las abejas entre otros. Eventos que son cruciales para la preservación de la vida en el planeta.

2. Análisis de difusión.

2.1. Características fundamentales de la difusión.

Si bien la ecuación de difusión se deriva de las leyes de Fick, también puede derivarse de la modelación del movimiento browniano, siempre y cuando se sigan las siguientes reglas:

1. Cada partícula da un paso a la izquierda o derecha con magnitud Δx en un tiempo Δt . La magnitud de estas cantidades dependerá de las características de las partículas, del fluido y temperatura.
2. La probabilidad de dar un paso a la izquierda es la misma que darlo a la derecha e igual $1/2$. Consecuencia de las colisiones de la partícula browniana con las partículas del fluido. Cabe resaltar que la partícula browniana no guarda memoria de lo ocurrido en el paso anterior.
3. Las partículas brownianas no interactúan entre sí, cada partícula se mueve independientemente de las otras. Esto se cumple solo a bajas densidades.

Se establece entonces el comportamiento para N partículas brownianas, donde $x_i(n)$ denota la posición de la i -ésima partícula en el n -ésimo paso, siguiendo esta lógica el movimiento de una partícula se es equivalente al anterior por una diferencia de $\pm\Delta x$, con este preámbulo se puede modelar lo siguiente

$$x_i(n) = x_i(n - 1) \pm \Delta x \quad (2.1)$$

con esto y recordando las reglas 2 y 3 se puede afirmar que, en promedio, después de un tiempo t la mitad de las partículas se habrán movido una distancia Δx y la otra otra mitad una distancia $-\Delta x$, por ende, al para encontrar el comportamiento promedio de los desplazamientos de todas las partículas es necesario calcular el promedio de los desplazamientos de las N partículas, es decir

$$\langle x \rangle = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x_i(n), \quad (2.2)$$

para encontrar su forma explícita es necesario usar la forma de $x_i(n)$, con esto se obtiene que

$$\langle x \rangle = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x_i(n - i) = \langle x(n - 1) \rangle, \quad (2.3)$$

de esto se concluye que el desplazamiento promedio no cambia después de n pasos, con lo que $\langle x \rangle = 0$, además que garantiza la existencia de una distribución de partículas simétrica respecto al

punto de origen. Ahora bien, si se calcula el desplazamiento cuadrático promedio se puede encontrar otro resultado,

$$\langle x^2(n) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^2(n-1) \pm 2x_i(n-1)\Delta x + \Delta x^2, \quad (2.4)$$

y al usar los resultados encontrados para el desplazamiento promedio el resultado de la ecuación (2.4) se reduce a

$$\langle x^2(n) \rangle = \langle x^2(n-1) \rangle + \Delta x^2. \quad (2.5)$$

entonces, si $n=1$ en la ecuación (2.5) se obtiene que $\langle x^2(1) \rangle = \Delta x^2$, y así con $n=2$ el resultado es $\langle x^2(2) \rangle = \langle x^2(1) \rangle + \Delta x^2 = 2\Delta x^2$ y así progresivamente, se puede concluir que

$$\langle x^2(n) \rangle = n\Delta x^2 \quad (2.6)$$

por lo tanto, si se quiere conocer como es el comportamiento con respecto al tiempo t es fácil reconocer que $t = n\Delta t$ así, la ecuación (2.6) tiene una dependencia temporal,

$$\langle x^2(n) \rangle = \frac{\Delta x^2}{\Delta t} t. \quad (2.7)$$

Aquí se destaca que, en el límite del continuo es decir $\Delta t \rightarrow 0$ y considerando que $D = \lim_{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta x^2}{2\Delta t}$, el desplazamiento promedio cuadrático es

$$\langle x^2(t) \rangle = 2Dt. \quad (2.8)$$

Así es la primera manera en que se puede relacionar el movimiento browniano con la difusión, empezando por la constante, sin embargo, se puede relacionar de la siguiente manera.

2.2. Deducción de la ecuación de difusión.

Supóngase una línea infinita (una rejilla en el caso de 2 dimensiones) donde la partícula browniana puede moverse libremente pero solo a los puntos vecinos, esto respetando las reglas establecidas anteriormente. Se define entonces la probabilidad de que la partícula vaya de la posición $j-1$ a la posición j por b y la probabilidad de que vaya de la posición $j+1$ a la posición j por a (probabilidad de salto a la derecha e izquierda respectivamente), con la condición de que $a+b=1$. De igual manera, se denota por $p_n(j)$ a la probabilidad de que la partícula se encuentre en la posición j en el n -ésimo paso, con esto, es posible armar la siguiente probabilidad

$$p_{n+1}(j) = ap_n(j+1) + bp_n(j-1), \quad (2.9)$$

lo que quiere decir la ecuación (2.9) es, que la probabilidad de encontrar a la partícula en la posición j en el paso $n+1$ depende a lo más de un estado anterior, es decir sus vecinos cercanos, los cuales son $j+1$ y $j-1$ en el paso n . Esto sirve para un proceso discreto, aún así se puede pasar al caso continuo reemplazando las variables discretas j y n por variables continuas, y dado que el tiempo para desplazarse una distancia Δx es Δt es posible establecer $t = n\Delta t$ y $x = j\Delta x$, lo cual permite reescribir la ecuación (2.9) en términos de variables continuas

$$p(x, t + \Delta t) = ap(x + \Delta x, t) + bp(x - \Delta x, t), \quad (2.10)$$

y como Δx y Δt son pequeños se puede hacer una aproximación mediante serie Taylor, de manera que es posible llegar a la ecuación de difusión (véase el apéndice A y B para más detalles)

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = \frac{\Delta x^2}{2\Delta t} \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} + \frac{\Delta x(a-b)}{\Delta t} \frac{\partial p(x, t)}{\partial x}, \quad (2.11)$$

que en el límite de $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$ se encuentra que,

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} - \nu \frac{\partial p(x, t)}{\partial x} \quad (2.12)$$

La ecuación anterior recibe el nombre de *ecuación de difusión con arrastre*. El arrastre esta cuantificado, es decir el segundo término del lado derecho de la ecuación, este último surge debido a la

existencia de una dirección preferencial en el movimiento, $a \neq b$, es decir que la probabilidad de salto no es igual respecto a una posición, algo que contradice la regla 2 establecidas anteriormente. En el caso particular $a = b$ la ecuación (2.11) se modifica, haciendo que el segundo termino desaparezca, y por otra parte hace que la regla número dos se cumpla, esto hace que la ecuación (2.11) se convierta en la ecuación de difusión de Fick,

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2}, \quad (2.13)$$

esta ecuación permite conocer la probabilidad de encontrar a la partícula en cada posición en cualquier tiempo.

De igual manera el concepto puede extenderse a 2 o más dimensiones, de tal forma que la ecuación de difusión adquiere la forma siguiente

$$\frac{\partial p(\vec{r}, t)}{\partial t} = D \nabla^2 p(\vec{r}, t). \quad (2.14)$$

Y sin pérdida de generalidad, se define a la concentración de partículas en la posición \vec{r} al tiempo t como

$$p(\vec{r}, t) = NC(\vec{r}, t) \quad (2.15)$$

2.2.1. Deducción de la ecuación de difusión con base a las leyes de Fick

Las leyes de Fick son postulados cuantitativos sobre como es el transporte de materia, energía o calor en función del flujo y además de la conservación de los mismos, es decir

- *Primera Ley de Fick, Movimiento espontáneo de partículas:*

El flujo está relacionado directamente con la concentración, de forma que el movimiento de las partículas va de una mayor concentración a una menor concentración, es decir

$$\vec{J} = -D \nabla c \quad (2.16)$$

el signo menos declara que el flujo de partículas es opuesto al cambio de concentración respecto a las posiciones y con D como la constante de proporcionalidad de la velocidad de que mueven por el are y por unidad de tiempo.

- *Segunda Ley de Fick conservación de materia:*

La concentración de partículas tiende a cambiar en el tiempo en un volumen arbitrario V , donde entra o sale un flujo de partículas, la masa que sale o entra por unidad de tiempo es proporcional al flujo multiplicado por el área del volumen V , en el caso de un continuo

$$\frac{\partial m}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \int_V c \, dV = - \int_A \vec{J} \cdot d\vec{A} \quad (2.17)$$

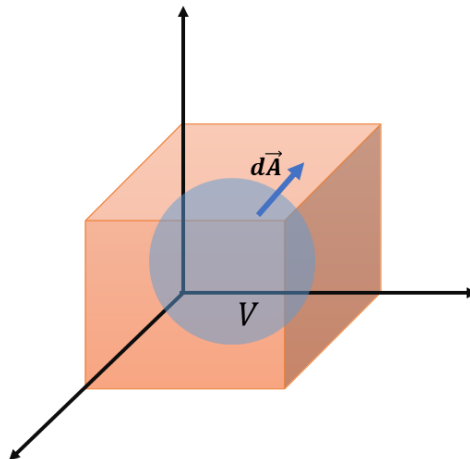


Figura 1: Esquematización del volumen donde sucede el análisis de la difusión de partículas

donde si $\vec{J} \bullet d\vec{A} > 0$ significa que sale material del volumen V y en el caso $\vec{J} \bullet d\vec{A} < 0$ entra material, por lo tanto, si el volumen es contante se tiene que

$$\int_V \frac{\partial c}{\partial t} dV = - \int_A \vec{J} \bullet d\vec{A}$$

donde es posible usar el teorema de la divergencia de Gauss, con lo que es posible escribir el problema en términos de integrales volumétricas,

$$\begin{aligned} \int_V \frac{\partial c}{\partial t} dV &= - \int_V \nabla \bullet \vec{J} dV \implies \\ \int_V \left[\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \bullet \vec{J} \right] dV &= 0 \end{aligned} \quad (2.18)$$

y como el volumen no es nulo se tiene necesariamente que cumplir lo siguiente

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \bullet \vec{J} \quad (2.19)$$

que relaciona al cambio de concentración en el tiempo con la variación del flujo respecto a las posiciones.

Ahora bien, notese que al mezclar ambas leyes es posible llegar a la ecuación de difusión, para ello es necesario sustituir la ecuación (2.16) en la ecuación (2.19),

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} &= -\nabla \bullet (-D\nabla c) \implies \\ \frac{\partial c}{\partial t} &= D\nabla^2 c \end{aligned} \quad (2.20)$$

que es la ecuación de difusión para tres dimensiones en geometría arbitraria.

2.3. Solución a la ecuación de difusión

La forma más simple para solucionar la ecuación de difusión sin condiciones de frontera es utilizando transformadas de Fourier. Dicho método permite escribir una ecuación en derivadas parciales a una ecuación diferencial ordinaria que solo depende del tiempo. La transformada de Fourier de la función vectorial $f(\vec{r})$, se define como,

$$\tilde{f}(\omega) = \tilde{F}\{f(\vec{r})\} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} f(\vec{r}) e^{i\omega\vec{r}} d\vec{r} \quad (2.21)$$

Al aplicar la transformada sobre la ecuación de difusión con arrastre en una dimensión (en esto no hay pérdida de generalidad), se tiene que

$$\tilde{F} \left\{ \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} \right\} = \tilde{F} \left\{ D \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} \right\} - \tilde{F} \left\{ \nu \frac{\partial p(x, t)}{\partial x} \right\}. \quad (2.22)$$

los operadores integral y diferencial conmutan, la ecuación obtenida para el primer termino a la izquierda de ecuación (2.21)

$$\tilde{F} \left\{ \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} \right\} = \frac{\partial}{\partial t} \tilde{F} \{p(x, t)\} \quad (2.23)$$

con la misma idea se prosigue para

$$\tilde{F} \left\{ \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} \right\} \equiv \frac{\partial}{\partial t} \tilde{p}(x, t). \quad (2.24)$$

Ahora bien, continuando por el segundo termino a la derecha de la ecuación se obtiene que,

$$\tilde{F} \left\{ \nu \frac{\partial p(x, t)}{\partial x} \right\} = \nu \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial p(x, t)}{\partial x} e^{i\omega x} dx, \quad (2.25)$$

y a través de integración por partes se llega a la siguiente expresión,

$$\tilde{F} \left\{ \nu \frac{\partial c(x, t)}{\partial x} \right\} = \nu \left[p(x, t) e^{i\omega x} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} i\omega p(x, t) e^{i\omega x} dx \right], \quad (2.26)$$

y dado que $p(x, t) e^{i\omega x} \Big|_{-\infty}^{\infty} \rightarrow 0$, se concluye lo siguiente,

$$\tilde{F} \left\{ \nu \frac{\partial p(x, t)}{\partial x} \right\} = -i\omega \nu \tilde{p}(x, t). \quad (2.27)$$

similarmente para el término restante, con lo cual se llega a

$$\tilde{F} \left\{ D \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} \right\} = -\omega^2 D \tilde{p}(x, t). \quad (2.28)$$

Al juntar las soluciones es posible escribir al transformada de fourier de la ecuación de difusión,

$$\frac{\partial \tilde{p}(x, t)}{\partial t} = (-D\omega^2 + i\nu\omega) \tilde{p}(x, t). \quad (2.29)$$

A partir de este punto existen dos formas de solucionar la ecuación diferencial, una es utilizando transformada de Laplace y la segunda es integrando, Por simplicidad se utilizará el segundo método. Para lo cual se utiliza separación de variables, con lo que se obtiene,

$$\frac{\partial \tilde{p}(x, t)}{\tilde{p}(x, t)} = (i\nu\omega - D\omega^2) \partial t. \quad (2.30)$$

Con solución de la forma siguiente

$$\tilde{p}(x, t) = \tilde{p}_0 e^{(i\nu\omega - D\omega^2)t}. \quad (2.31)$$

Al invertir la transformada de Fourier se llega a

$$p(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{p}_0 e^{(i\nu\omega - D\omega^2)t} e^{-i\omega x} d\omega, \quad (2.32)$$

la integral se resuelve a través de la extensión al campo complejo (más detalles en el apéndice C)

$$p(x, t) = \frac{\tilde{p}_0}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-(x-\nu t)^2/4Dt}. \quad (2.33)$$

La ecuación de difusión sin arrastre se obtiene haciendo $\nu t = 0$. Notese que, bajo esta situación la distribución es gaussiana, donde la desviación cuadrática media es $\sigma^2 = 2Dt$. Cuando el tiempo avanza la distribución se hace más ancha y pierde altura, el ancho incrementa como $\sqrt{2Dt}$, pero el área bajo la curva permanece constante.

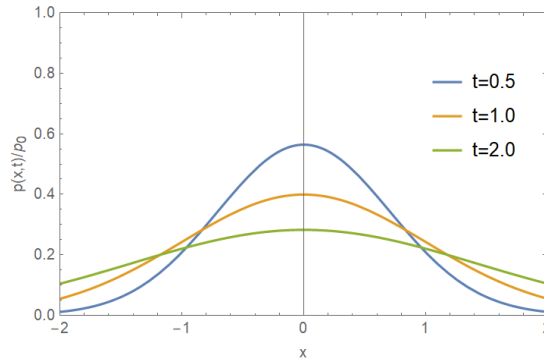


Figura 2: Comportamiento espacial de la solución a la ecuación de difusión a tiempos constantes, aquí $D = 1$.

2.3.1. Solución analítica de la ecuación de difusión por separación de variables

EN la ecuación de difusión se propone una solución separable, es decir $c(x, t) = X(x)T(t)$, que al sustituir en la ecuación de difusión se puede obtener la estructura siguiente

$$X(x) \frac{\partial T(t)}{\partial t} = DT(t) \frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2} \quad (2.34)$$

donde es posible escribir que

$$\frac{1}{T(t)} \frac{\partial T(t)}{\partial t} = \frac{D}{X(x)} \frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2} \quad (2.35)$$

la única forma en que esto sea posible es que ambas derivadas sean iguales a una constante, por ejemplo, $-\lambda$, de esta forma se puede proseguir con las soluciones independientes de cada función,

- Para la parte temporal

$$\frac{1}{DT(t)} \frac{\partial T(t)}{\partial t} = -\lambda \implies T(t) = T_0 e^{-\lambda Dt} \quad (2.36)$$

- Para la parte espacial

$$\frac{1}{X(x)} \frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2} = -\lambda \implies X(x) = A \cos(\sqrt{\lambda}x) + B \sin(\sqrt{\lambda}x) \quad (2.37)$$

en el caso de la parte espacial existen diferentes soluciones para los distintos valores de λ (si es mayor a cero, menor a cero o cero), sin embargo, el problema de difusión tiene sentido cuando la constante λ es mayor a cero.

Ahora bien, la forma de la constante λ depende de las condiciones de frontera (mas detalles en la sección siguiente), en muchos caso depende de un parámetro n tal que cuantiza la solución en modos de vibración tales que es posible definir el sistema como una combinación lineal de funciones oscilantes, de esta manera se tiene que

$$c(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} [\tilde{A} \cos(\sqrt{\lambda_n}x) + \tilde{B} \sin(\sqrt{\lambda_n}x)] e^{-\lambda_n Dt}. \quad (2.38)$$

2.4. Difusión con condiciones de frontera.

Al trabajar con ecuaciones diferenciales parciales es necesario establecer condiciones de frontera específicas para obtener una solución capaz de describir una situación de forma precisa o en su defecto aproximada. Unas cuantas condiciones de frontera que se suelen utilizar en difusión son las siguientes:

- **Frontera absorbente** (condición de frontera tipo Dirichlet)

Una frontera absorbente tiene la propiedad de remover del sistema cualquier partícula que este en contacto con ella. Esto implica que, la concentración de partículas en la frontera a todo tiempo es igual a cero; si \vec{r} es un punto sobre la frontera, es decir,

$$p(\vec{r}, t) = 0. \quad (2.39)$$

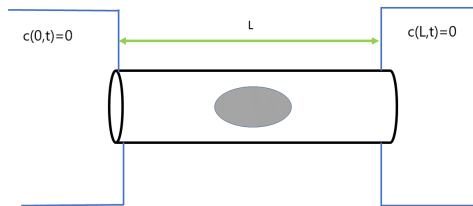


Figura 3: Ejemplo de fronteras absorbentes, sea un tubo de longitud L unido a dos repositorios

En la figura ambos repositorios son infinitos y se encuentran vacíos, de tal manera que la concentración de partículas en $x = 0$ y $x = L$ es cero en comparación al tamaño del repositorio. El punto gris representa la concentración inicial de partículas.

En este caso, la ecuación (2.38) obtiene un forma específica,

$$c(0, t) = 0 = [\tilde{A}]e^{-\lambda_n Dt} \implies \tilde{A} = 0, \quad (2.40)$$

$$c(0, t) = 0 = [\tilde{B} \text{sen}(\sqrt{\lambda}L)]e^{-\lambda Dt} \implies \sqrt{\lambda} = \frac{n\pi}{L}, \quad (2.41)$$

entonces, la constante \tilde{B} se determina por condiciones iniciales, sin embargo depende de cada n que se seleccione para representar el problema, por lo que la combinación lineal de las funciones oscilantes es una solución también, así

$$c(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \text{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) e^{-\frac{n^2 \pi^2}{L^2} Dt}. \quad (2.42)$$

■ **Frontera reflejante** (Condición de frontera tipo Neumann)

Una frontera reflejante tiene la propiedad de cambiar la dirección en la que se mueven las partículas cuando estas entran en contacto con la frontera; gracias a esto, el flujo de partículas a través de este tipo de fronteras es igual a cero,

$$\frac{\partial p(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}} = 0. \quad (2.43)$$

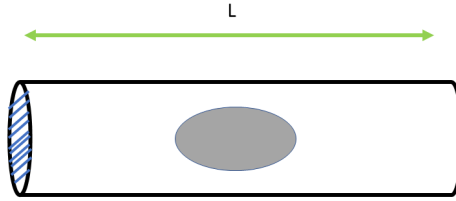


Figura 4: Ejemplo de un tubo de longitud L con fronteras reflejantes

En la figura el tubo tiene las fronteras selladas en $x = 0$ y $x = L$, de tal manera que las partículas que alcanzan la frontera no son capaces de cruzarla y regresan al tubo.

En el caso de la ecuación (2.38) se obtiene lo siguiente para las constantes

$$\left. \frac{\partial c(x, t)}{\partial x} \right|_{x=0} = 0 = \sqrt{\lambda} \tilde{B} e^{-\lambda Dt} \implies \tilde{B} = 0, \quad (2.44)$$

$$\left. \frac{\partial c(x, t)}{\partial x} \right|_{x=L} = 0 = -\sqrt{\lambda} \tilde{A} \text{sen}(\sqrt{\lambda}L) e^{-\lambda Dt} \implies \sqrt{\lambda} = \frac{n\pi}{L}. \quad (2.45)$$

justo como en el caso de fronteras absorbentes la constante \tilde{A} se determina por condiciones iniciales, y de nueva manera la solución es la combinación lineal de las funciones oscilantes, por lo tanto

$$c(x, t) = a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos \left(\frac{n\pi}{L} x \right). \quad (2.46)$$

■ **Frontera parcialmente absorbente** (Condición de frontera tipo Robin)

Una frontera parcialmente absorbente tiene la propiedad de solo dejar pasar un porcentaje de partículas del total que entra en contacto con ella. Se asigna entonces una constante de

proporcionalidad κ , la cual describe la eficiencia que posee la frontera de dejar pasar a las partículas, matemáticamente se puede escribir como,

$$\frac{\partial p(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}} = \kappa p(\vec{r}, t). \quad (2.47)$$

Este tipo de fronteras puede presentar a κ como una función de la posición o bien del tiempo, un ejemplo notable es que la frontera convierte parcialmente a las partículas mediante reacción química o bien un malla que es capaz de filtrar solo ciertas partes del flujo total. Es claro que estas condiciones de frontera son no homogéneas, por ende la solución de este tipo de problemas varía de caso en caso, sin embargo la forma usual de solucionar este tipo de problemas consiste en la combinación de un estado estacionario y un estado transitorio.

Ahora bien, no todas las condiciones de frontera son estrictamente como las que aquí se presentan, pueden ser iguales a una constante o incluso funciones dependientes del tiempo y posición, lo importante aquí es que cualquiera que sea la condición de frontera esta tenga un significado físico, dado que no todas las condiciones de frontera lo poseen.

Para más detalles de como obtener las constantes a_0, a_n y b_n véase el apéndice E.

2.4.1. Estado estacionario de la ecuación de difusión

Con el conocimiento sobre las condiciones de frontera bajo las que puede estar sujeta el problema de difusión se puede proceder a encontrar una forma explícita de un problema, por simplicidad se revolverá el estado estacionario de la ecuación de Difusión, esto es que $\partial p(x, t)/\partial t \rightarrow 0$ mientras $t \rightarrow \infty$. De manera que,

$$\nabla^2 p(\vec{r}, t) = 0 \quad (2.48)$$

cuya solución depende de la geometría y simetrías del sistema, por ejemplo, en el caso de difusión a través de una membrana con simetría radial de longitud L que posee una concentración de partículas diferentes en cada uno de los extremos la ecuación a resolver es

$$\frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} = 0.$$

Con solución

$$p(x) = \alpha_1 x + \alpha_2, \quad (2.49)$$

donde las condiciones de frontera son

- $p(0, t) = c_1$
- $p(L, t) = c_2$

estas fronteras no son absorbentes, pero suministran una concentración constante de partículas al sistema para cumplir con el modelo establecido, así la solución a este problema es

$$p(x) = \frac{c_1 - c_2}{L} x + c_2. \quad (2.50)$$

Este problema puede expandirse a otro tipo de geometrías, por ejemplo si se desea analizar a una proteína o micela que se concentra de forma esférica (con radio b) y únicamente dependencia radial la ecuación a resolver es

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 (rp)}{\partial r^2} = 0.$$

Con solución

$$p(r) = \alpha_1 + \frac{\alpha_2}{r} \quad (2.51)$$

donde las condiciones de frontera son

- $p(b) = 0$.
- $p(r \rightarrow \infty) = c_\infty$.

Notese que la frontera en b es absorbente y la frontera en $r \rightarrow \infty$ es una condición que establece que la concentración de partículas tiene a una constante mientras r crece. Con esto la solución a la difusión en esta configuración es

$$p(r) = c_\infty - \frac{bc_\infty}{r}. \quad (2.52)$$

Con esto se puede ver que la difusión depende fuertemente de la geometría del sistema.

2.5. Tiempo promedio de captura

Ya con los conceptos básicos de la difusión aclarados ahora toca analizar un poco más a fondo como es su comportamiento temporal. Ya se ha aclarado que la distribución de partículas respecto a su punto de inicio es simétrica, sin importar cual sea este. De primera mano pareciera no ser importante conocer la posición inicial de las partículas, pero en presencia de paredes absorbentes la probabilidad de que estas sobrevivan al proceso tiene un tiempo límite y ese tiempo disminuye si la posición inicial de las partículas es cerca de una de las fronteras, sea entonces

$$\frac{\partial}{\partial t}p(x, t|x_0) = D\frac{\partial^2}{\partial x_0^2}p(x, t|x_0). \quad (2.53)$$

Esta ecuación recibe el nombre de *backwards equation* (ecuación hacia atrás en español). Lo que dice esta ecuación es, la probabilidad de encontrar a la partícula en la posición x al tiempo t cuando su posición inicial es x_0 . Paralelamente es posible calcular la probabilidad de supervivencia para la partícula a partir de la misma ecuación, al integrar respecto a la posición

$$\int_0^L \frac{\partial}{\partial t}p(x, t|x_0)dx = D \int_0^L \frac{\partial^2}{\partial x_0^2}p(x, t|x_0)dx$$

las derivadas e integrales conmutan, por lo tanto considerando que $Q(t|x_0) = \int_0^L p(x, t|x_0)dx$, es decir la probabilidad de supervivencia en el intervalo $[0, L]$, se llega a

$$\frac{\partial}{\partial t}Q(t|x_0) = D\frac{\partial^2}{\partial x_0^2}Q(t|x_0). \quad (2.54)$$

La integral respecto al tiempo de la ecuación anterior resulta en lo siguiente

$$Q(t|x_0)|_0^\infty = D\frac{\partial^2}{\partial x_0^2}\langle T \rangle, \quad (2.55)$$

donde $\langle T \rangle$ es el tiempo promedio de supervivencia.

Ahora bien para tiempos pequeños la probabilidad de supervivencia es 1, para tiempos grandes la partícula habrá alcanzado la frontera absorbente y entonces la probabilidad decae a cero, esto significa que

$$D\frac{\partial^2\langle T \rangle}{\partial x_0^2} = -1 \quad (2.56)$$

este concepto puede expandirse para dos y tres dimensiones, así

$$\nabla^2\langle T(\vec{x}_0) \rangle = -\frac{1}{D}. \quad (2.57)$$

Las ecuaciones (2.53) y (2.56) son muy útiles, dado que como se ha visto, los resultados están fuertemente influenciados por la geometría del sistema. Por ejemplo, para un sistema de simetría radial y de longitud L con una pared reflejante en $x_0 = 0$ y una absorbente $x_0 = L$. La solución al problema es

$$\langle T \rangle = -\frac{1}{2D}x_0^2 + A_1x_0 + A_2$$

de acuerdo a las condiciones de frontera se encuentra que la forma específica es

$$\langle T(x_0) \rangle = -\frac{x_0^2}{2D} + \frac{L^2}{2D}, \quad (2.58)$$

aquí hay dos formas de analizar el resultado, si la posición x_0 es fija y si $0 < x_0 < L$, de ambas maneras el parámetro que define el tiempo de supervivencia será la longitud del segmento cilíndrico.

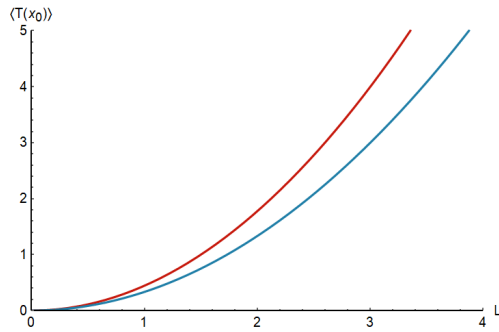


Figura 5: Comportamiento de la probabilidad de supervivencia respecto al valor de L . Con frontera absorbente en $x_0 = L$ y frontera reflejante en $x_0 = 0$. La línea roja representa el valor fijo de $x_0 = L/3$, la línea azul representa el comportamiento donde x_0 tiene la misma probabilidad de encontrarse en $0 < x_0 < L$. El valor utilizado para el coeficiente de difusión es $D = 1$.

3. Análisis de difusión con reinicio.

3.1. Reinicio de Poisson.

El comportamiento definido como reinicio consiste en una partícula difusiva que cada cierto tiempo regresa a una posición concreta, usualmente definida como posición de reinicio y denotada por X_r (más detalles en la figura). El como se encuentran distribuidos los reinicios a lo largo de tiempo es exponencial. Todo comportamiento donde los eventos están distribuidos a lo largo del tiempo de forma exponencial se define como un proceso de Poisson.

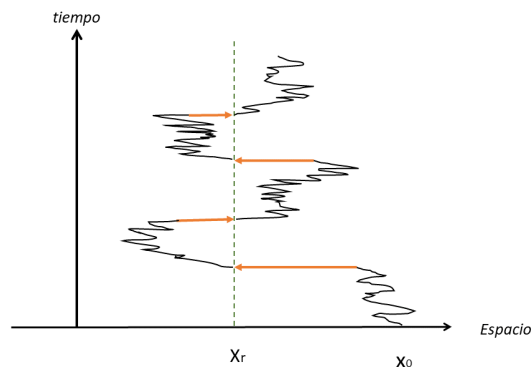


Figura 6: Ejemplo de difusión con reinicio en una dimensión.

Para esto se define la velocidad/razón de reinicio a la posición X_r , como r , donde r puede ser una constante e incluso una función dependiente del espacio y/o tiempo, para fines de este trabajo se considera como constante.

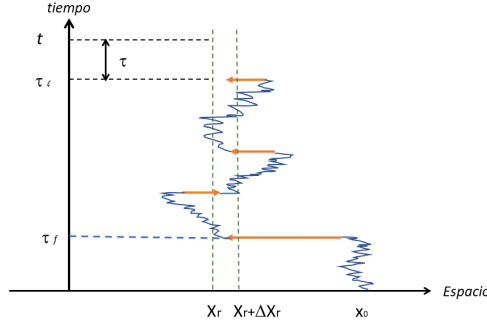


Figura 7: Difusión con reinicio donde r es una distribución de posiciones a donde puede reiniciar la partícula.

3.2. Características básicas de la difusión con reinicio

Las reglas para la difusión con reinicio, sea $x(t)$ la posición de la partícula al tiempo t , la posición de la partícula al siguiente tiempo tiene dos alternativas

$$\begin{aligned} x(t + \Delta t) &= X_r \text{ con prob. } r\Delta t \\ &= x(t) \pm \xi(t)(\Delta t)^{1/2} \text{ con prob. } (1 - r\Delta t) \end{aligned} \quad (3.1)$$

Esto quiere decir que existe la posibilidad de que la partícula difusiva reinicie en el tiempo $t + \Delta t$ pero también de que no lo haga, y la posición siguiente es equivalente a la posición anterior afectada por un factor de $\pm \xi(t)(\Delta t)^{1/2}$, (término que es equivalente al Δx presentado en la ecuación (2.1), adicionalmente, $\xi(t)$ es una variable estocástica gaussiana dependiente del tiempo con las siguientes propiedades

$$\langle \xi(t) \rangle = 0 \quad (3.2)$$

$$\langle \xi^2(t) \rangle = 2D \quad (3.3)$$

Con estas propiedades es posible escribir la densidad de probabilidad (también conocida como ecuación maestra) para una partícula que comienza en la posición x_0 y con posición de reinicio X_r por $p(x, t|x_0)$, dicha ecuación es la siguiente

$$p(x, t + \Delta t) = r\Delta t p(x, 0|X_r) + (1 - r\Delta t) \int_{-\infty}^{\infty} d\xi f(\xi) p(x - \xi(\Delta t)^{1/2}, t), \quad (3.4)$$

la integral es sobre ξ , dado que al ser una variable aleatoria gaussiana posee una densidad de probabilidad gaussiana, en este caso denotada por $f(\xi)$, ya que se busca conocer como es la distribución de probabilidad acumulada cuando la posición de la partícula se ve afectada por una variable estocástica.

A partir de este punto lo que se busca encontrar la forma de la ecuación de difusión con reinicio, esto es posible gracias a la ecuación (3.4), esto al realizar una serie de Taylor alrededor de $-\xi(\Delta t)$ en el caso de la integral y en el lado izquierdo respecto a Δt , de tal forma que

$$\begin{aligned} p(x, t + \Delta t) &= r\Delta t p(x, 0|X_r) + (1 - r\Delta t) \int_{-\infty}^{\infty} d\xi f(\xi) \\ & * \left[p(x, t) - (\Delta t)^{1/2} \xi \frac{\partial p(x, t)}{\partial x} + \frac{(\Delta t) \xi^2}{2} \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} + \dots \right], \end{aligned} \quad (3.5)$$

al promediar sobre las ξ^n y aplicando las propiedades en (3.2) y (3.3) es posible llegar a (para detalles adicionales revisar el apéndice D)

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} - r p(x, t) + r p(x, 0|X_r) \quad (3.6)$$

que es la ecuación de difusión con reinicio, notese que si $r = 0$ se recupera la ecuación de difusión sin reinicio. El obtener la *backwards equation* es bastante similar como en el caso de la ecuación

maestra. De forma adicional, si en la ecuación (3.6) se hacen cero el primer y tercer término a la derecha de la ecuación (o en su defecto son despreciables) se llega a

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = -rp(x, t) \quad (3.7)$$

que tiene como solución

$$p(x, t) = e^{-rt}, \quad (3.8)$$

Esta ecuación se ve de la forma siguiente, suponiendo a $r = cte$.

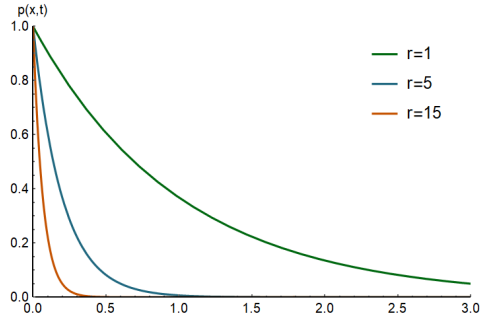


Figura 8: Comportamiento de la probabilidad con distintas tasas de reinicio.

En esta figura los reinicios están distribuidos a lo largo de la línea, esto implica (como se había establecido con anterioridad) que los reinicios están separados en el tiempo de forma exponencial, al graficar estos reinicios contra el tiempo se obtiene una distribución de Poisson, esta es la razón por la cual se llama reinicio de Poisson.

3.3. Aproximación a las ecuaciones de renovación.

Existe una forma de escribir las soluciones para la ecuación (3.6), para ello es necesario usar el propagador de la ecuación de difusión, que también es una función de Green para la difusión, esta función se encuentra denotada por $G_0(x, t|x_0)$, misma que satisface la ecuación de difusión, esto es

$$\frac{\partial G_0(x, t|x_0)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 G_0(x, t|x_0)}{\partial x^2} \quad (3.9)$$

con solución idéntica a la encontrada en (2.33)

$$G_0(x, t|x_0) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4Dt}}. \quad (3.10)$$

Con este propagador es posible construir la densidad de probabilidad para un proceso con reinicio. Para ello deben considerarse dos partes fundamentales que contribuyen, una viene de las trayectorias donde el reinicio no ha ocurrido en un tiempo t , esto sucede con probabilidad e^{-rt} y la segunda son las aportaciones de todas trayectorias posibles desde el último reinicio, ocurrido en un tiempo $t_l = t - \tau$, todas ellas poseen una densidad de probabilidad propia, esta es $re^{-r\tau}$, de esta forma es posible escribir la ecuación de última renovación,

$$p(x, t|x_0) = e^{-rt} G_0(x, t|x_0) + r \int_0^t d\tau e^{-r\tau} G_0(x, \tau|X_\tau). \quad (3.11)$$

Esto puede ser más claro con el diagrama presentado en la figura 9, cabe destacar que el propagador puede ser diferente al que se ha considerado hasta el momento.

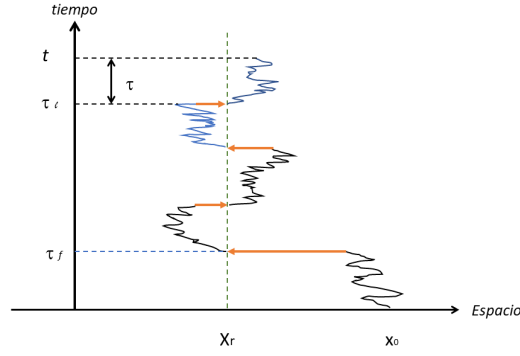


Figura 9: Proceso difusivo en una ventana de tiempo t , donde t_l es el tiempo donde ocurrió el ultimo reinicio y t_f el momento donde ocurrió el primer reinicio.

De igual manera se puede considerar el tiempo $t - t_f$, que es la ventana de tiempo restante del proceso, al considerar este tiempo la partícula aun puede reiniciar por lo que usar el propagador de difusión para la suma de trayectorias no es una opción. Con estas consideraciones se puede escribir la ecuación de primer renovación

$$p(x, t|x_0) = e^{-rt}G_0(x, t|x_0) + r \int_0^t d\tau_f e^{-r\tau_f} p(x, t - \tau)|X_r, \quad (3.12)$$

ambas ecuaciones de renovación resultan importantes para describir procesos de reinicio, dado que puede interesar un proceso de donde es importante considerar los reinicios que existen en una ventana de tiempo o bien un proceso donde interesa conocer la probabilidad que existe de continuar un proceso de difusión después del último reinicio.

3.4. Supervivencia en presencia de un blanco absorbente

Hasta ahora se han considerado procesos estocásticos bajo reinicio con objetivo a alcanzar por el proceso. En el caso de procesos difusivos se considera un blanco que absorbe las partícula difusiva (el buscador del blanco) y termina el proceso.

Para comenzar se considerará el caso de difusión en una dimensión de la sección 2.1. La partícula (o buscador) comienza en la posición inicial x_0 y difunde con constante de difusión D con reinicio estocástico a X_r con velocidad de reinicio r . Cuando la partícula alcanza el blanco ésta es absorbida (ver la figura 10). Se dese encontrar la probabilidad de supervivencia $Q_r(x_0, t|X_r)$ de una partícula difusiva al tiempo t , siendo que empieza en x_0 en $t = 0$ con reinicio a X_r . El subíndice r enfatiza que ésta cantidad pertenece a un procesos con reinicio. Como se ha podido ver hasta el momento los resultados del análisis de estos eventos se simplifican cuando $X_r = x_0$. En lo siguiente se recurrirá a $Q_0(x_0, t|X_r)$, que denota la probabilidad de supervivencia en ausencia de reinicio.

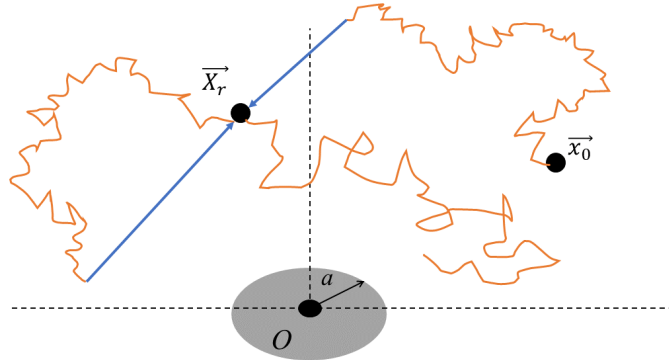


Figura 10: Difusión de una partícula en dos dimensiones con posición inicial \vec{x}_0 y reinicio a \vec{X}_r , en presencia de un blanco absorbente de radio a con centro en el origen

Hay múltiples aproximaciones que utilizar para encontrar la probabilidad de supervivencia: por ejemplo, se puede utilizar la ecuación maestra de avance, la ecuación maestra hacia atrás o una aproximación a la ecuación de renovación.

3.4.1. Probabilidad de supervivencia con reinicio de poisson.

Para procesos generales con reinicio de Poisson, es posible relacionar de manera simple la probabilidad de supervivencia con reinicio, esto es Q_r , a una sin reinicio, Q_0 . Una forma conveniente es establecer esta relación es utilizando la ecuación de ultima renovación, la cual se lee como

$$Q_r(x_0|t) = e^{-rt}Q_0(x_0, t) + r \int_0^t d\tau e^{-r\tau}Q_0(X_r, \tau)Q_r(x_0, t - \tau), \quad (3.13)$$

donde se han simplificado las notaciones, esto es $Q_r(x_0, t|X_r) = Q_r(x_0, t)$ y similarmente para Q_0 . Ahora bien, ¿Qué significan los términos en la ecuación (3.13)? Usando las similitudes que se tienen con la ecuación de renovación, así, el primer término representa las trayectorias donde no ha habido reinicio. El segundo término representa trayectorias en donde ha ocurrido eventos de reinicio. La integral sobre τ , que representa el tiempo transcurrido desde el ultimo reinicio y se tiene una convolución de probabilidades de supervivencia: la supervivencia que empieza en x_0 y que sufre reinicio hasta el tiempo $t - \tau$ (el tiempo desde el ultimo reinicio) y la supervivencia de empezar X_r en ausencia de reinicio, con duración τ (véase al figura 9).

Ahora, definiendo la transformada de Laplace de la probabilidad de supervivencia se define que

$$\tilde{Q}_r(x_0, s) = \mathcal{L}\{Q_r(x, t)\} = \int_0^\infty dt e^{-st}Q_r(x_0, t). \quad (3.14)$$

Entonces la transformación de la ecuación (3.13) es

$$\mathcal{L}\{Q_r(x_0|t)\} = \mathcal{L}\{e^{-rt}Q_0(x_0|t)\} + \mathcal{L}\left\{\int_0^t d\tau rQ_0(X_r, \tau)Q_r(x_0, t - \tau)\right\}$$

es necesario usar el *teorema de traslación* y el *teorema de convolución*, respectivamente

$$\mathcal{L}\{e^{-at}f(t)\} = F(t + a)$$

$$\mathcal{L}\{f(t)\} * \mathcal{L}\{g(t)\} = \mathcal{L}\left\{\int_0^t f(t-x)g(x)dx\right\}$$

lo que deriva en

$$\tilde{Q}_r(x_0, s) = \tilde{Q}_0(x_0, s + r) + r\mathcal{L}\{e^{-rt}Q_0(X_r, t)\}\mathcal{L}\{Q_r(x_0, t)\}$$

así

$$\tilde{Q}_r(x_0, s) = \tilde{Q}_0(x_0, s + r) + r\tilde{Q}_0(X_r, r + s)\tilde{Q}_r(x_0, s) \quad (3.15)$$

donde es posible obtener una expresión fija para $\tilde{Q}_r(x_0, s)$,

$$\tilde{Q}_r(x_0, s) = \frac{\tilde{Q}_0(x_0, r + s)}{1 - r\tilde{Q}_0(X_r, r + s)} \quad (3.16)$$

Este es un resultado bastante general para el reinicio de Poisson, ya que, la transformada de Laplace de la probabilidad de supervivencia en presencia reinicio se relaciona con la transformada de la probabilidad de supervivencia en ausencia de reinicio.

En el caso específico donde la posición inicial y la posición de reinicio coincide, con lo que la ecuación (3.16) se simplifica a

$$\tilde{Q}_r(X_r, s) = \frac{\tilde{Q}_0(X_r, r + s)}{1 - r\tilde{Q}_0(X_r, r + s)}. \quad (3.17)$$

De esta manera, nuevamente, se relaciona la probabilidad de supervivencia bajo reinicio con la probabilidad de supervivencia en ausencia de reinicio. Así se pueden obtener las primeras trayectorias en presencia de reinicio.

3.4.2. La probabilidad de supervivencia con una combinación de procesos.

La expresión $Q_0(x_0, t)$, representa la probabilidad de supervivencia de una partícula difusiva que empieza su proceso en x_0 con su correspondiente transformada de Laplace, $\tilde{Q}_0(x_0, s)$.

Se puede escribir una ecuación general para el propagador $G_0(x_0, t)$ que va de x_0 a x como una integral sobre el primer tiempo en que alcanza a x

$$G_0(x, t|x_0) = \int_0^t \phi_0(x, \tau|x_0)G_0(x, t - \tau|x) d\tau \quad (3.18)$$

donde $\phi_0(x, \tau|x_0)$ es la densidad de probabilidad de alcanzar la posición x por primera vez en el tiempo t . Al tomar la transformada de Laplace se obtiene

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\{G_0(x, t|x_0)\} &= \mathcal{L}\{G_0(x, t|x)\}\mathcal{L}\{\phi_0(x, t|x_0)\} \implies \\ \tilde{G}_0(x, s|x_0) &= \tilde{G}_0(x, s|x)\tilde{\phi}_0(x, s|x_0) \\ \tilde{\phi}_0(x, s|x_0) &= \frac{\tilde{G}_0(x, s|x_0)}{\tilde{G}_0(x, s|x)} \end{aligned} \quad (3.19)$$

Este es un resultado general para la distribución del primer arribo para procesos Markovianos, cuya transformada de Laplace esta en términos de la transformada del Laplace del propagador del proceso G_0 .

Ahora, $\phi_0(x, s|x_0)$ es equivalente a la velocidad de absorción de un blanco absorbente en x , entonces para el caso donde el blanco se encuentra en el origen

$$\phi_0(0, t|x_0) = -\frac{\partial}{\partial t}Q_0(x_0, t). \quad (3.20)$$

Y su transformada de Laplace es

$$\tilde{\phi}_0(0, s|x_0) = -(s\tilde{Q}_0(x_0, s) - 1). \quad (3.21)$$

(Notese que se ha utilizado nuevamente la condición inicial $Q_0(x_0, 0) = 1$. Entonces, al utilizar lo encontrado en la ecuación (3.19) se llega a

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{G}_0(0, s|x_0)}{\tilde{G}_0(0, s|x)} &= 1 - s\tilde{Q}_0(x_0, s) \\ \tilde{Q}_0(x_0, s) &= \frac{1}{s} \left(1 - \frac{\tilde{G}_0(0, s|x_0)}{\tilde{G}_0(0, s|x)} \right). \end{aligned} \quad (3.22)$$

Este es un resultado general ya que relaciona la probabilidad de supervivencia de una partícula que reinicia con el propagador de un proceso sin reinicio.

Finalmente, hay que encontrar la transformada de Laplace del propagador difusivo $G_0(x_0, t)$,

$$\mathcal{L}\{G_0(x_0, t)\} = \tilde{G}_0(x, s) = \int_0^\infty e^{-st}G_0(x_0, t) dt \quad (3.23)$$

donde $G_0(x_0, t)$ tiene la misma forma que en la ecuación (3.10),

$$\tilde{G}_0(x, s|x_0) = \int_0^\infty \frac{1}{(4\pi D)^{1/2}} t^{-1/2} \exp\left[-st - \frac{|x-x_0|^2}{4Dt}\right] dt$$

el cual es una integral especial, dado que cumple con la siguiente forma (vease la referencia [7], ecuación 3.471.9)

$$\int_0^\infty t^{\nu-1} e^{-\frac{\beta}{t} - \gamma t} dt = 2 \left(\frac{\beta}{\gamma}\right)^{\nu/2} K_\nu(2\sqrt{\beta\gamma}) \quad (3.24)$$

donde K_ν es la función de Bessel de segundo tipo de orden ν , y particularmente para el problema $\nu = 1/2$,

$$K_{1/2}(y) = \left(\frac{\pi}{2y}\right)^{1/2} \quad (3.25)$$

de forma que el resultado final de la integral especial es

$$\int_0^{\infty} t^{\nu-1} e^{-\frac{\beta}{t} - \gamma t} = \left(\frac{\pi}{\gamma}\right)^{1/2} e^{-2\sqrt{\beta\gamma}} \quad (3.26)$$

y en el problema se tiene que $\gamma = s$ y $\beta = |x - x_0|^2/4D$, además de un factor $1/(4\pi D)^{1/2}$ multiplicando a la integral, así, se obtiene finalmente la transformada de Laplace del propagador difusivo

$$\tilde{G}_0(x, s|x_0) = \frac{1}{2(Ds)^{1/2}} e^{(s/D)^{1/2}|x-x_0|} \quad (3.27)$$

que al usarlo en la ecuación (3.22) deriva en lo siguiente

$$\tilde{Q}_0(x_0, s) = \frac{1}{s} \left(1 - \frac{(e^{-(s/D)^{1/2}x_0}/[2(Ds)^{1/2}])}{(1/[2(Ds)^{1/2}])} \right)$$

con lo que se es posible concluir que,

$$\tilde{Q}_0(x_0, s) = \frac{1 - e^{-(1/s)^{1/2}x_0}}{s}. \quad (3.28)$$

Para complementar los resultados es necesario conocer la parte real de la transformada de Laplace, es decir su inversa. Dicha función inversa es como se muestra continuación

$$Q_0(x_0, t) = \operatorname{erf}\left(\frac{x_0}{2\sqrt{Dt}}\right), \quad (3.29)$$

esto puede deducirse de una forma más intuitiva que buscar simplemente en tablas, sin embargo hay que hacer consideraciones extra. Para esto hay que tener en cuenta la suma de probabilidades; la de supervivencia y de primer arribo es igual a uno, mientras una decrece la otra aumenta y viceversa, esto es

$$Q_0(x_0, t) + \Phi(x_0, t) = 1 \implies Q_0(x_0, t) = 1 - \Phi(x_0, t)$$

donde $\Phi(x_0, t)$ es la probabilidad de primer arribo, y la densidad de probabilidad es proporcional a $D\partial c(x_0, t)/\partial t$ en $x = 0$ y con $t \rightarrow \infty$ donde $c(x_0, t)$ es la concentración de probabilidad para el proceso difusivo, la cual debe tener las consideraciones de difundir a la derecha e izquierda, esto es

$$c(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} [e^{-(x-x_0)^2/4Dt} - e^{-(x+x_0)^2/4Dt}],$$

de tal forma que

$$\Phi(0, t) = \int_0^t D \frac{\partial}{\partial t'} c(0, t') \Big|_{x=0} dt'$$

consecuentemente se llega a que

$$\Phi(0, t) = \int_0^t \frac{x_0}{4\pi Dt'^3} e^{-x_0^2/4Dt'} dt'$$

a través de un cambio de variable $u^2 = x_0^2/4Dt'$ la integral cambia a la siguiente forma

$$\begin{aligned} \int_0^t \frac{x_0}{4\pi Dt'^3} e^{-x_0^2/4Dt'} dt' &= -\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\infty}^{x_0/\sqrt{4Dt}} e^{-u^2} du \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{x_0^2/4Dt}^{\infty} e^{-u^2} du \\ &= \operatorname{erfc}\left(\frac{x_0}{\sqrt{4Dt}}\right) \\ &= 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x_0}{\sqrt{4Dt}}\right). \end{aligned}$$

Al volver a la ecuación propuesta anteriormente y sustituir este resultado se tiene lo siguiente,

$$Q_0(x_0, t) = 1 - \int_0^t \frac{x_0}{\sqrt{4dt'^3}} e^{-x_0^2/4Dt'} dt' = 1 - \left[1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x_0}{\sqrt{4Dt}}\right) \right]$$

que se simplifica en el resultado de la ecuación (3.26).

Ahora, es posible encontrar la forma específica de la probabilidad de supervivencia gracias a a la ecuación (3.16), (3.22) y (3.25)

$$\tilde{Q}_r(x_0, s) = \frac{\frac{1 - e^{-\alpha x_0}}{s + r}}{1 - r \frac{1 - e^{-\alpha x_r}}{s + r}}$$

donde $\alpha = \alpha(s)$, concretamente

$$\alpha(s) = \left(\frac{r + s}{D} \right)^{1/2}, \quad (3.30)$$

esto permite escribir la probabilidad de supervivencia con reinicio de forma compacta, es decir,

$$\tilde{Q}_r(x_0, s) = \frac{1 - e^{-\alpha x_0}}{s + r e^{-\alpha x_r}}. \quad (3.31)$$

Si $\alpha(0) = \alpha_0$, donde $\alpha_0 = (r/D)^{1/2}$. En el caso donde la posición de reinicio X_r coincide con la posición x_0 se obtiene

$$\tilde{Q}_r(X_r, s) = \frac{1 - e^{-\alpha x_0}}{s + r e^{-\alpha x_0}}. \quad (3.32)$$

Gracias a esta expresión se podría pensar que invertir la transformada de Laplace es lo ideal para obtener $Q_r(X_r, t)$.

Para completar lo establecido para la ecuación (3.25) se recurre a la ecuación hacia atrás de Foker-Planck para la probabilidad de supervivencia dada por

$$\frac{\partial Q_0(x_0, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 Q_0(x_0, t)}{\partial x_0^2} \quad (3.33)$$

con condición de frontera $Q_0(0, t) = 0$ y con condición inicial $Q_0(x_0, t = 0) = 1$ para $x_0 \neq 0$. La transformada de Laplace permite obtener lo siguiente

$$\begin{aligned} \mathcal{L} \left\{ \frac{\partial Q_0(x_0, t)}{\partial t} \right\} &= \mathcal{L} \left\{ D \frac{\partial^2 Q_0(x_0, t)}{\partial x_0^2} \right\} \\ s \tilde{Q}_0(x_0, s) - 1 &= D \frac{\partial^2 \tilde{Q}_0(x_0, s)}{\partial x_0^2} \end{aligned} \quad (3.34)$$

esto permite solucionar a la ecuación diferencial para una sola variable, y este problema consiste de la combinación de dos soluciones, una solución particular y una solución homogénea, respectivamente son

$$\begin{aligned} F_p(x_0, s) &= \frac{1}{s} \\ F_h(x_0, s) &= A e^{-(s/D)^{1/2} x_0} + B e^{(s/D)^{1/2} x_0} \end{aligned}$$

sin embargo debe B necesariamente debe ser cero, ya que la probabilidad de supervivencia no crece respecto al tiempo o bien la variable s en el espacio de Laplace, así

$$\tilde{Q}_0(x_0, s) = A e^{-(s/D)^{1/2} x_0} + \frac{1}{s} \quad (3.35)$$

y al transformar la condición de frontera $\tilde{Q}_0(0, s) = 0$, de esta manera se encuentra que $A = -1/s$,

$$\tilde{Q}_0(x_0, s) = \frac{1}{s} \left[1 - e^{-(s/D)^{1/2} |x_0|} \right], \quad (3.36)$$

se utiliza $|x_0|$ porque de lo contrario el comportamiento diverge, lo cual no es valido, notese además que se recupera la ecuación (3.28).

3.5. Proceso de primer arribo/tiempo promedio de captura (FPP/MTA).

Para el proceso difusivo con reinicio es posible terminar el tiempo promedio en que la partícula alcanza el origen (la posición del blanco absorbente) desde una posición arbitraria x , para ello es necesario encontrar la función de densidad de probabilidad del tiempo para el proceso difusivo, este se encuentra dado por $-\partial Q_r(x, t)/\partial t dt$ (probabilidad de que la partícula haya sido absorbida por el blanco en el intervalo $[t, t + \Delta t]$). El signo menos se debe a que la razón de cambio de la probabilidad de supervivencia es decreciente, , de esta manera al utilizar la definición de promedio se encuentra el tiempo promedio de captura

$$\langle T(X) \rangle = - \int_0^\infty t \frac{\partial Q_r(x, t)}{\partial t} dt = \int_0^\infty Q_r(x, t) dt \quad (3.37)$$

la última igualdad se encuentra de integrar por partes. Pero la última integral es proporcional a la transformada de Laplace de la probabilidad en presencia de reinicio al hacer $s = 0$ en la ecuación (3.14) y respectivamente en su forma final en (3.32),

$$\begin{aligned} \langle T(x_0) \rangle &= \tilde{Q}_r(x_0, 0) = \int_0^\infty Q_r(x_0, t) dt = \frac{1 - e^{-\alpha_0 x_0}}{r e^{-\alpha_0 x_0}} \\ \langle T(x_0) \rangle &= \frac{e^{\alpha_0 x_0} - 1}{r}. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Para llegar a este resultado se hizo uso de la ecuación de última renovación, sin embargo este no es el único procedimiento que se puede seguir para encontrar el tiempo promedio de captura, es posible explotar el comportamiento de la ecuación diferencial que gobierna a la probabilidad de supervivencia, este método se conoce como la aproximación de Fokker-Planck.

Para utilizar esta técnica es necesario integrar respecto a una geometría arbitraria la ecuación de difusión con reinicio se encuentra la ecuación diferencial para la probabilidad de supervivencia para un proceso con reinicio se tiene que

$$\frac{\partial Q_r}{\partial t} = D \frac{\partial^2 Q_r}{\partial x^2} - r Q_r(x, t) + Q(x_0, t), \quad (3.39)$$

que junto al resultado de la ecuación (3.37) se llega a

$$\int_0^\infty \frac{\partial Q_r(x, t)}{\partial t} dt = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_0^\infty Q_r(x, t) dt - r \int_0^\infty Q_r(x, t) dt + \int_0^\infty Q(x_0, t) dt \implies \quad (3.40)$$

$$-1 = \frac{\partial^2 \langle T(x) \rangle}{\partial x^2} - r \langle T(x) \rangle + r \langle T(x_0) \rangle, \quad (3.41)$$

Notese además que se recupera lo establecido en la sección (2.5), ahora bien, se obtiene una ecuación diferencial ordinaria no homogénea, entonces, únicamente es necesario resolver la parte homogénea y la particular, las cuales son

$$\langle T(x) \rangle = B e^{-\alpha_0 x} + \frac{1 + r \langle T(x_0) \rangle}{r} \quad (3.42)$$

y gracias a la condición de frontera $\langle T(0) \rangle = 0$ es posible encontrar el valor de la constante B , que es

$$B = - \frac{1 + r \langle T(x_0) \rangle}{r} \quad (3.43)$$

y de esta manera se tiene el tiempo promedio de captura completamente definido,

$$\langle T(x) \rangle = \frac{1 + r \langle T(x_0) \rangle}{r} (1 - e^{-\alpha_0 x}). \quad (3.44)$$

Se puede encontrar la forma explícita cuando la partícula se encuentra en punto x_0 ,

$$\begin{aligned} \langle T(x_0) \rangle &= \frac{1 + r \langle T(x_0) \rangle}{r} (1 - e^{-\alpha_0 x_0}) \implies \\ \langle T(x_0) \rangle &= \frac{e^{\alpha_0 x_0} - 1}{r}. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Ahora bien, sin importar la metodología utilizada es posible minimizar el valor del tiempo promedio de absorción si se usa como variable a la constante de reinicio r , por lo que debe cumplirse que

$$\frac{\partial \langle T(x_0) \rangle}{\partial r} = 0 \quad (3.46)$$

gracias a esto se llega a la siguiente conclusión

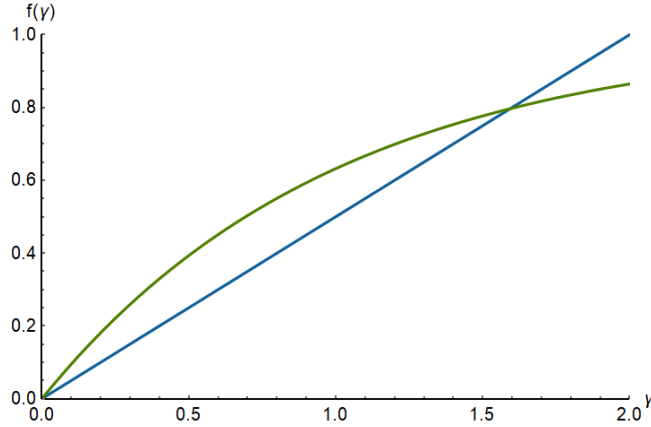


Figura 11: Comportamiento de las funciones que minimizan el tiempo del proceso de captura de la partícula

$$\frac{\partial \langle T(x_0) \rangle}{\partial r} = \frac{\frac{rx_0}{2\sqrt{rD}} e^{\alpha_0 x_0} - (e^{\alpha_0 x_0} - 1)}{r^2} = 0$$

y al usar la variable reducida $\gamma = \alpha_0 x_0$ se encuentra que

$$1 - e^{-\gamma} + \frac{1}{2}\gamma = 0 \implies e^{-\gamma} - 1 = \frac{\gamma}{2} \quad (3.47)$$

esta es una ecuación trascendente, no tiene solución analítica pero si numérica, por lo tanto, encontrando los puntos de intersección de ambas curvas se obtienen las soluciones aproximadas al problema, véase la figura 11, así el valor que minimiza el tiempo de supervivencia (además de la solución trivial cero) es $\gamma = 1.5936\dots$. Esto se cumple siempre que la partícula se encuentre a una distancia x_0 del blanco.

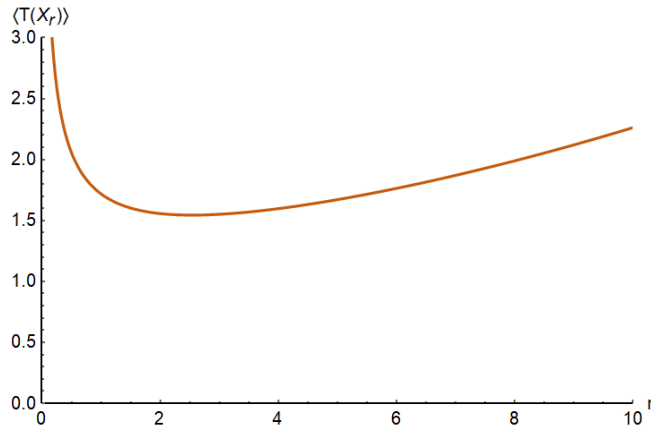


Figura 12: Comportamiento del tiempo promedio de absorción en función de r ($D = 1$, y $x_0 = 1$)

Notese que si $r = 0$ el tiempo promedio de absorción se va a infinito, que es el resultado esperado del problema de una partícula difusiva en presencia de un blanco absorbente. Sin embargo el resultado es el mismo si $r \rightarrow \infty$, dado que la partícula apenas tiene tiempo para difundir y no se aleja de su posición de reinicio, alargando así el proceso de primer arribo.

3.6. Reinicio dependiente de la posición

Todo el análisis hecho hasta el momento se concentró en utilizar a r como una constante, sin embargo, si dependiera de las posiciones puede hacerse exactamente el mismo análisis, incluso encontrar el tiempo promedio de supervivencia de la partícula y todo esto gracias a una generalización de la ecuación maestra de distribución de probabilidad establecida en la ecuación (3.6),

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2} - r(x)p(x,t) + \int r(x)p(x,t|X_r)\delta(x-x_0)dx \quad (3.48)$$

el ultimo término se debe a la condición inicial $\delta(x-x_0) = p(x_0,0)$.

Es posible encontrar una expresión general para el tiempo promedio de supervivencia siguiendo el procedimiento hecho con anterioridad, con lo que se tiene lo siguiente

$$-1 = \frac{\partial^2 \langle T(x) \rangle}{\partial x^2} - r(x)\langle T(x) \rangle + r(x)\langle T(x_0) \rangle. \quad (3.49)$$

La dificultad de este problema depende de la forma explicita de $r(x)$ y la forma de minimizar el proceso también depende de ello.

Como ejemplo es bueno considerar una "ventana de reinicio", donde la partícula es libre de difundir en cierto intervalo y que tiene cierta probabilidad de reiniciar una vez que alcanza cierto valor, teniendo así dos procesos subyacentes dependientes de la posición (difusión libre y difusión con reinicio), una forma perfecta de ejemplificar esto es con la siguiente función,

$$r(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } |x-x_0| < a \\ r & \text{si } |x-x_0| \geq a \end{cases} \quad (3.50)$$

en este caso al minimizar una función se obtendría una función dependiente de la distancia difundida y su posición inicial, lo que eleva la complejidad del problema, tanto que el encontrar la posición efectiva (diferente de cero) permanece como un problema abierto.

4. Probabilidad de supervivencia en presencia de dos fronteras absorbentes

Este problema se diferencia respecto al anterior debido a las condiciones de frontera, eso es claro, sin embargo existen dos tipos de formas diferentes de llegar a los resultados, ambos han sido utilizados con anterioridad.

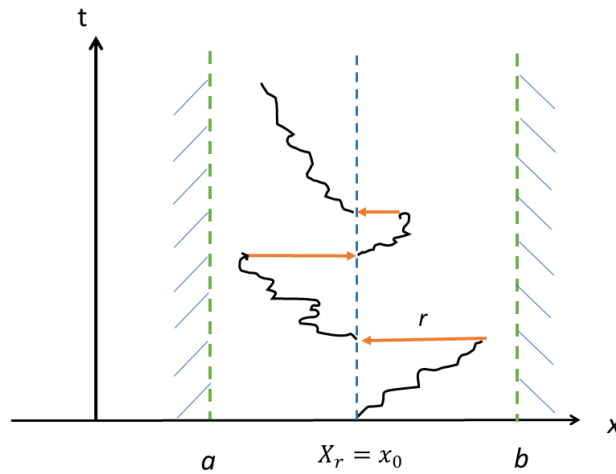


Figura 13: Esquemático del problema de una partícula en un dominio con fronteras absorbente y sujeta a reinicio.

A su vez existe otro aspecto a considerar, que es el tiempo de primer arribo, debido a la existencia de dos fronteras absorbentes existen dos escenarios para el tiempo promedio de supervivencia,

dado que se puede considerar el tiempo promedio en que la partícula alcanza *cualquiera* de las dos fronteras, y por otra parte el tiempo promedio en el que alcanza una frontera específica. El primer caso recibe el nombre de *tiempo promedio de primer arribo incondicional* y el segundo tiene el nombre de *tiempo promedio de primer arribo condicional*.

4.1. Formalismo de Focker-Planck

Para esta aproximación se necesita la ecuación de difusión con reinicio para la supervivencia de la partícula, es decir la *backwards master equation*, entonces

$$\frac{\partial Q_r(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 Q_r(x, t)}{\partial x^2} - r Q_r(x, t) + r Q_r(x_0, t), \quad (4.1)$$

se aplica la transformada de Laplace y nuevamente, se utiliza la misma notación que en capítulo 3, al igual que la misma condición inicial donde $Q_r(x, 0) = 1$, así, se tiene lo siguiente

$$\begin{aligned} s\tilde{Q}_r(x, s) - 1 &= D \frac{\partial^2 \tilde{Q}_r(x, s)}{\partial x^2} - r\tilde{Q}_r(x, s) + r\tilde{Q}_r(x_0, s) \implies \\ D \frac{\partial^2 \tilde{Q}_r(x, s)}{\partial x^2} - (s+r)\tilde{Q}_r(x, s) &= -1 - r\tilde{Q}_r(x_0, s). \end{aligned} \quad (4.2)$$

Es una ecuación diferencial no homogénea, la solución consiste de dos partes, las cuales son,

$$\begin{aligned} \tilde{Q}_{rh}(x, s) &= ce^{\alpha x} + de^{\alpha x} = A \cosh(\alpha x) + B \sinh(\alpha x) \\ \tilde{Q}_{rp}(x, s) &= \frac{1 + r\tilde{Q}_r(x_0, s)}{r + s} \end{aligned} \quad (4.3)$$

la segunda igualdad en la solución particular se debe a que s y r son estrictamente positivos. Entonces la solución es

$$\tilde{Q}_r(x, s) = A \cosh(\alpha x) + B \sinh(\alpha x) + \frac{1 + r\tilde{Q}_r(x_0, s)}{r + s} \quad (4.4)$$

ahora bien, las condiciones de frontera ofrecen un sistema de ecuaciones a resolver para A y B que deriva en lo siguiente

$$\begin{aligned} A &= \left[\frac{\sinh(\alpha a) - \sinh(\alpha b)}{\sinh(\alpha(b-a))} \right] \frac{1 + r\tilde{Q}_r(x_0, t)}{s + r} \\ B &= \left[\frac{\cosh(\alpha b) - \cosh(\alpha a)}{\sinh(\alpha(b-a))} \right] \frac{1 + r\tilde{Q}_r(x_0, t)}{s + r} \end{aligned} \quad (4.5)$$

de tal manera que, al establecer $x = x_0$ es posible escribir la solución de la forma siguiente

$$\tilde{Q}_r(x_0, s) = \frac{1 - g_r(x_0, s)}{s + r g_r(x_0, s)} \quad (4.6)$$

donde se ha definido que

$$g_r(x_0, s) = \frac{\sinh(\alpha(b-x_0)) + \sinh(\alpha(x_0-a))}{\sinh(\alpha(b-a))} \quad (4.7)$$

y a la par α sigue siendo lo mismo definido en capítulos anteriores, para más detalles de cómo se llega a la ecuación (4.7) véase el apéndice F.

Ahora bien, notese que si la primera frontera se encuentra en el origen, es decir $a = 0$ y que la otra frontera se encuentra muy distante $b \rightarrow \infty$ se encuentra un resultado importante

$$\begin{aligned} \lim_{b \rightarrow \infty, a=0} \frac{\sinh(b-x_0)\alpha + \sinh((x_0-a)\alpha)}{\sinh(b-a\alpha)} &= \\ \lim_{b \rightarrow \infty, a=0} \frac{\sinh(b-x_0)\alpha + \sinh(x_0\alpha)}{\sinh(b\alpha)} &= \\ \lim_{b \rightarrow \infty} \frac{e^{-\alpha x_0}(e^{b\alpha} - e^{-b\alpha}) + e^{x_0\alpha} - e^{-x_0\alpha}}{e^{b\alpha} - e^{-b\alpha}} &= e^{-\alpha x_0} \end{aligned}$$

esta aproximación genera que la probabilidad de supervivencia se simplifique en el resultado encontrado para el caso de un blanco absorbente ubicado en el origen

$$\tilde{Q}_r(x_0, s) = \frac{1 - e^{-\alpha x_0}}{s + r e^{-\alpha x_0}} \quad (4.8)$$

el mismo que en la ecuación (3.32).

4.2. Formalismo de renovación

Los procesos de difusión con reinicio pueden ser descritos mediante algo que se llama procesos de renovación, al igual que se describió en la sección 3.3 se puede utilizar la ecuación de última renovación para analizar el proceso difusivo con nuevas condiciones a la frontera, empezando por

$$Q_r(x_0, t) = e^{-rt} Q_0(x_0, t) + r \int_0^t e^{-r\tau} Q_0(x_0, \tau) Q_r(x_0, t - \tau) d\tau \quad (4.9)$$

los términos representan lo mismo que la ecuación (3.13) y por supuesto su transformada de Laplace es exactamente la misma que en la ecuación (3.16), pero con $X_r = x_0$, es decir,

$$\tilde{Q}_r(x_0, s) = \frac{\tilde{Q}_0(x_0, r + s)}{1 - r \tilde{Q}_0(x_0, r + s)}, \quad (4.10)$$

es posible describir al proceso de supervivencia de una partícula difusiva sin reinicio $Q_0(x_0, t)$ mediante la ecuación de difusión, misma que se puede resolver de forma analítica por medio de las series de Fourier, en este caso como la partícula no puede sobrevivir en las fronteras entonces se omite la parte par de las series de Fourier, esto es los términos cosenoidales, por lo que quedan únicamente las funciones seno. Entonces, es posible darle forma a la solución mediante las siguientes condiciones al problema de la ecuación de difusión

- El dominio del problema es (a, b) .
- Condición inicial $Q_0(x_0, 0) = 1$.
- Fronteras absorbentes en los extremos del dominio.

Así las eigenfunciones son,

$$\psi_n(x_0) = b_n \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi(x_0 - a)}{b - a} \right) \quad (4.11)$$

por lo tanto la serie de Fourier que representa este problema es

$$Q_0(x_0, t) = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \Phi(n) \psi_n(x_0) e^{-\frac{n^2 \pi^2 D t}{(b-a)^2}} \quad (4.12)$$

donde $\Phi(n) = \frac{1 - \cos(n\pi)}{n\pi}$ es el coeficiente de Fourier del problema (apéndice G). Notese que los eigenvalores k_n denotan la forma en que la n -ésima eigenfunción decae con el tiempo, entonces al calcular la transformada de Laplace de este resultado se llega a

$$\begin{aligned} \tilde{Q}_0(x_0, s) &= \int_0^{\infty} 2 \sum_{n=1}^{\infty} \Phi(n) \psi_n(x_0) e^{-\frac{n^2 \pi^2 D t}{(b-a)^2}} e^{-st} dt \\ \tilde{Q}_0(x_0, s) &= \frac{2 \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n(x_0) \Phi(n)}{k_n + s} \end{aligned} \quad (4.13)$$

que al sustituirlo en la ecuación (4.10) se obtiene que

$$\tilde{Q}_r(x_0, s) = \frac{2 \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n(x_0) \Phi(n) / (k_n + r + s)}{1 - 2r \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n(x_0) \Phi(n) / (k_n + r + s)}. \quad (4.14)$$

Los resultados de ambos formalismos aunque se vean diferentes son proporcionales y sirven para describir al fenómeno de difusión con reinicio.

4.3. Densidad de posiciones de una partícula

En presencia de una o dos fronteras absorbentes una partícula difusiva será absorbida en ausencia de reinicio. Entonces, con reinicio la partícula tiene probabilidad de pasar por todas las posiciones del dominio $[a, b]$, y dado que es un dominio arbitrario puede considerarse como un dominio continuo, por lo que tiene una gran cantidad de posiciones donde puede estar la partícula, por lo tanto se puede definir una función de densidad de posiciones para la misma. Sea $P_r(x, t|x_0)$ la probabilidad de encontrar a la partícula en una posición x al tiempo t siendo que esta inicio en la posición x_0 y con múltiples reinicios a la posición x_0 . Gracias al formalismo de renovación es posible escribir la función $P_R(x, t|x_0)$ como

$$P_r(x, t|x_0) = e^{-rt}P_0(x, t|x_0) + r \int_0^t \tau e^{-r\tau} P_-(x, \tau|x_0) Q_r(x_0, t - \tau) d\tau \quad (4.15)$$

todos los términos en la ecuación pueden interpretarse de la misma manera que se construyó la ecuación de última y primer renovación. De igual manera que se hizo para la probabilidad de supervivencia se toma la transformada de Laplace, y tras un desarrollo idéntico se encuentra que

$$\tilde{P}_r(x, s|x_0) = \tilde{P}_0(x, s+r|x_0) + r\tilde{P}_0(x, s+r)\tilde{Q}_r(x_0, s)$$

y se conoce la forma explícita de $\tilde{Q}_r(x_0, s)$, por lo tanto,

$$\tilde{P}_r(x, s|x_0) = \frac{\tilde{P}_0(x, s+r|x_0)}{1 - r\tilde{Q}_r(x_0, s+r)}. \quad (4.16)$$

Sin embargo no se conoce la forma explícita de $\tilde{P}_0(x, s)$, pero se puede encontrar fácilmente dado que dicha expresión cumple con la ecuación de difusión sin reinicio,

$$\frac{\partial P_0(x, t|x_0)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P_0(x, t|x_0)}{\partial x^2} \quad (4.17)$$

y al aplicar la transformada de Laplace sobre esta ecuación se obtiene lo siguiente

$$s\tilde{P}_0(x, s) - \delta(x - x_0) = D \frac{\partial^2 \tilde{P}_0(x, t|x_0)}{\partial x^2} \quad (4.18)$$

que es una ecuación diferencial homogénea con solución

$$\tilde{P}_0 = Ae^{x\sqrt{s/D}} + Be^{-x\sqrt{s/D}}. \quad (4.19)$$

Queda claro que los valores A y B dependen de las condiciones de frontera, sin embargo, para no hacer lo mismo que el caso de la probabilidad de supervivencia se analiza la forma funcional que no puede tener la partícula cuando se acerca a las fronteras. Cuando $x \rightarrow a \implies \tilde{P}_0(a, s) = 0$, entonces el perfil que modela la función de probabilidad en ese punto es una combinación antisimétrica de las exponenciales; eso significa que una función seno hiperbólico modela perfectamente esa situación. Ahora bien, en el caso de cuando la partícula se aproxima a la otra frontera se tiene el mismo escenario, lo que lleva a las siguientes consideraciones

$$\begin{aligned} \tilde{P}_{0<} &= A \sinh\left(\sqrt{\frac{s}{D}}(x-a)\right), & x < x_0 \\ \tilde{P}_{0>} &= B \sinh\left(\sqrt{\frac{s}{D}}(b-x)\right), & x < x_0 \end{aligned} \quad (4.20)$$

donde la multiplicación de estas funciones lleva a la forma final de la solución, es decir,

$$\tilde{P}_0 = C \sinh\left(\sqrt{\frac{s}{D}}(x-a)\right) \sinh\left(\sqrt{\frac{s}{D}}(b-x)\right) \quad (4.21)$$

donde la constante C se determina a través de integrar la ecuación (4.18) en un intervalo infinitesimal centrado en x_0 , proporcionando así

$$\left. \frac{\partial \tilde{P}}{\partial x} \right|_{x=x_0^+} - \left. \frac{\partial \tilde{P}}{\partial x} \right|_{x=x_0^-} = -\frac{1}{D} \quad (4.22)$$

para esto debe tenerse en cuenta que la función seno hiperbólico es una función impar y la función coseno hiperbólico es una función par, entonces esto deja para la ecuación anterior lo siguiente,

$$A\sqrt{\frac{s}{D}} \left[\sinh \left(\sqrt{\frac{s}{D}}(b-a) \right) \right] = \frac{1}{D} \quad (4.23)$$

lo que simplifica a $\tilde{P}_0(x, s)$ en

$$\tilde{P}_0(x, s) = \frac{\sinh \left(\sqrt{\frac{s}{D}}(x-a) \right) \sinh \left(\sqrt{\frac{s}{D}}(b-x) \right)}{\sqrt{sD} \sinh \left(\sqrt{\frac{s}{D}}(b-a) \right)} \quad (4.24)$$

entonces, con ayuda de la ecuación (4.10) es posible llegar a la forma explícita de $\tilde{P}_r(x, s|x_0)$,

$$\tilde{P}_r(x, s|x_0) = \alpha \frac{\sinh((x-a)\alpha) \sinh((b-x)\alpha)}{s \sinh((b-a)\alpha) - r[\sinh((x-a)\alpha) + \sinh((b-x)\alpha)]} \quad (4.25)$$

o bien como una combinación lineal de identidades trigonométricas,

$$\tilde{P}_r(x, s|x_0) = \frac{\alpha}{2} \frac{\cosh((b-a-|x-x_0|)\alpha) - \cosh((b-a-x-x_0)\alpha)}{s \sinh((b-a)\alpha) - r[\sinh((x-a)\alpha) + \sinh((b-x)\alpha)]} \quad (4.26)$$

esta última expresión ayuda a evaluar el flujo de probabilidad existente en cualquier punto del domino, ayudando así a encontrar comportamientos específicos para los dominios $x > x_0$ y $x < x_0$. Esto último cobrará más importancia cuando se analice el proceso de primer arribo condicionado.

4.4. Proceso de primer arribo incondicional

Cómo se mencionó al inicio de la sección este proceso se distingue por el hecho de que no importa la frontera que absorba la partícula, solo interesa el tiempo total en que sobrevive la partícula, entonces, bajo esta directiva se utiliza el concepto de tiempo de primer arribo como se ha analizado hasta el momento.

4.4.1. Tiempo promedio de primer arribo

Dado que se conoce la expresión que describe a la probabilidad de supervivencia en presencia de reinicio para este problema de dos fronteras absorbentes se hace uso de la definición anteriormente utilizada,

$$\langle T_r(x_0) \rangle = \int_0^\infty t \left[-\frac{\partial Q_r(x_0, t)}{\partial t} \right] dt = \tilde{Q}_r(x_0, s \rightarrow 0) \quad (4.27)$$

y obteniendo así

$$\langle T_r(x_0) \rangle = \frac{1 - g_r(x_0, 0)}{r g_r(x_0, 0)} \quad (4.28)$$

notese que así se recupera la ecuación en términos de α_0 , de forma que el tiempo promedio se convierte en

$$\langle T_r(x_0) \rangle = \frac{1}{r} \left[\frac{\sinh((b-a)\alpha_0)}{\sinh((b-x_0)\alpha_0) + \sinh((x_0-a)\alpha_0)} - 1 \right]. \quad (4.29)$$

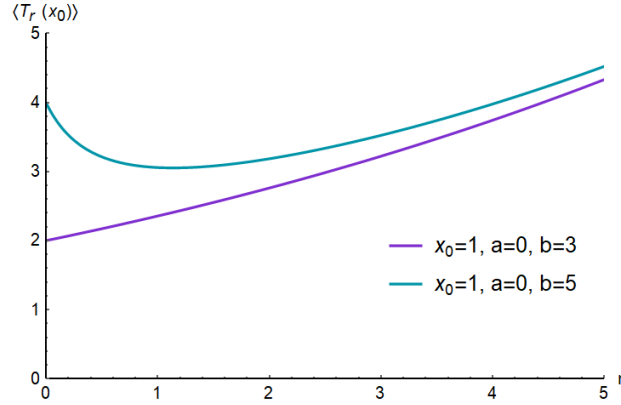


Figura 14: Comparativa de los tiempos promedio de salida $\langle T_r(x_0) \rangle_+$ (linea azul) y $\langle T_r(x_0) \rangle_-$ (linea amarilla) como funciones de r , Los parámetros usados son $a = 0$, $b = 3$ y $D = 1/2$ respectivamente

Resulta importante encontrar cómo es el tiempo promedio de supervivencia sin reinicio, para esto solo basta con hacer $r \rightarrow 0$, los detalles a continuación,

$$\begin{aligned} \langle T_0(x_0) \rangle &= \frac{1}{r} \left[\frac{\sinh((b-a)\alpha_0) - \sinh((b-x_0)\alpha_0) - \sinh((x_0-a)\alpha_0)}{\sinh((b-x_0)\alpha_0) + \sinh((x_0-a)\alpha_0)} \right] \\ &= \frac{1}{r} \frac{\sinh((b-x_0)\alpha_0)(\cosh((x_0-a)\alpha_0) - 1) + \sinh((x_0-a)\alpha_0)(\cosh((b-x_0)\alpha_0) - 1)}{\sinh((b-x_0)\alpha_0) + \sinh((x_0-a)\alpha_0)} \end{aligned}$$

el segundo renglón hace uso de que $\sinh[(b-x_0) + (x_0-a)]\alpha_0 = \sinh(b-a)\alpha_0$, seguido de esto se usa la identidad de la suma de ángulos y se hacen expansiones en serie de Taylor a primer orden para el seno hiperbólico y hasta segundo orden para el coseno hiperbólico respecto a α_0 ,

$$\langle T_0(x_0) \rangle = \frac{1}{r} \frac{\frac{(x_0-a)^2 \alpha_0^2}{2} (b-x_0) + \frac{(b-x_0)^2 \alpha_0^2}{2} (x_0-a)}{(b-a)\alpha_0} = \frac{\alpha_0^2}{2r} \frac{(b-x_0)(x_0-a)}{b-a} (b-a),$$

y finalmente al recordar que $\alpha_0 = \sqrt{r/D}$ se encuentra finalmente el tiempo promedio de primer arribo para un proceso sin reinicio bajo las mismas condiciones de frontera,

$$\langle T_0(x_0) \rangle = \frac{(x_0-a)(b-x_0)}{2D}. \quad (4.30)$$

En la figura 14 se muestra el comportamiento del tiempo promedio $\langle T_r(x_0) \rangle$, se puede ver que dependiendo del valor de los parámetros, el tiempo promedio encuentra un mínimo antes o bien después, sin embargo no hay una forma concluyente de establecer cómo es que los parámetros logran esto, al menos de forma inmediata, más detalles de como analizar a los parámetros en la subsección siguiente.

4.4.2. Criterio de reanudación/reinicio.

Este es el nombre que recibe la razón existente entre la desviación estándar $\sigma(T_0(x_0))$ y el tiempo promedio de primer arribo sin reinicio, $\langle T_0(x_0) \rangle$, es decir

$$\frac{\sigma(\langle T(x_0) \rangle)}{\langle T(x_0) \rangle} = CV \quad (4.31)$$

con CV como el criterio de reinicio.

Usar el criterio de reanudación permite ver la “interacción” existente entre los parámetros a , b y x_0 , para esto es necesario encontrar a $\sigma(\langle T_0(x_0) \rangle)$ y a $\langle T_0 \rangle$. En el caso de la desviación estándar basta con su definición,

$$\sigma^2(X) = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 \quad (4.32)$$

y en este caso, por definición se tiene que

$$\langle T_0^2(x_0) \rangle = -2 \left. \frac{\partial \tilde{Q}_0(x_0, s)}{\partial s} \right|_{s \rightarrow 0}. \quad (4.33)$$

Donde $\tilde{Q}_0(x_0, s)$ es el limite de $r \rightarrow 0$ de la ecuación (4.6), que es

$$\tilde{Q}_0(x_0, s) = \frac{\sinh(b-a)\sqrt{s/D} - \sinh(b-x_0)\sqrt{s/D} - \sinh(x_0-a)\sqrt{s/D}}{s \sinh(b-a)\sqrt{s/D}} \quad (4.34)$$

después de la derivación respecto a s y tomar el limite $s \rightarrow 0$ se encuentra,

$$\langle T_0^2(x_0) \rangle = (x_0 - a)(b - x_0) \frac{(b - a)^2 + (b - x_0)(x_0 - a)}{12D^2}. \quad (4.35)$$

Para más detalles de como se llega a la ecuación (4.33) y al resultado expuesto en la ecuación (4.35) véase el apéndice J.

Por lo tanto, para sigma se tiene

$$\sigma(\langle T_0(0) \rangle) = \sqrt{\frac{(b-x_0)(x_0-a)[(b-a)^2 - 2(b-x_0)(x_0-a)]}{12D^2}}$$

ya con esto es posible encontrar la forma explicita en términos de a , b y x_0 al criterio de reanudación,

$$CV = \sqrt{\frac{\frac{(x_0-a)(b-x_0)[(b-a)^2 - 2(b-x_0)(x_0-a)]}{12D^2}}{\frac{(b-x_0)^2(x_0-a)^2}{4D^2}}}$$

$$CV = \sqrt{\frac{4(b-a)^2 - 8(b-x_0)(x_0-a)}{12(b-x_0)(x_0-a)}} \quad (4.36)$$

y al establecer que $CV > 1$ se tiene que

$$4(b-a)^2 - 8(b-x_0)(x_0-a) > 12(b-x_0)(x_0-a)$$

$$L^2 + 3L + 1 + 5u^2 - 5(L+1)u > 0 \quad (4.37)$$

donde $L = a/b$ y $u = x_0/b$.

De la ecuación (4.25) debe verse un factor muy importante, que es el criterio es independiente del coeficiente de difusión D , algo importante porque involucra el movimiento de la partícula, lo único que figura en el son las combinaciones de las distancias x_0 , a y b . Entonces, para simplificar el problema se hace $a = 0$, con lo que se obtiene

$$5u^2 - 5u + 1 > 0 \quad (4.38)$$

con solución

$$u_{\pm} = \frac{5 \pm \sqrt{5}}{10} \quad (4.39)$$

el dominio solución es entonces

$$\mathcal{D} = [(0, u_-) \cup (u_+, 1)] \quad (4.40)$$

el dominio termina a lo más en 1 dada la relación existente para u . El dominio da los puntos en los que la partícula termina su proceso difusivo con mayor rapidez, y como era de esperarse si se encuentra más cerca es decir que se encuentre entre los intervalos del dominio, $0 < x_0 < bu_-$ y $bu_+ < x_0 < 1$, por otra parte si se encuentra en el intervalo $bu_- < x_0 < bu_+$ significa que la partícula se encuentra justo en medio, haciendo que el proceso se prolongue, y dado que la partícula no tiene dirección preferencial el proceso se prolonga si se encuentra justo aquí.

4.4.3. Valor óptimo de reinicio

Con el análisis anterior se puede ver que el proceso subyacente se puede se puede acelerar bajo ciertos parámetros en la posición, sin embargo, es posible encontrarlo a través de la minimización del tiempo de primer arribo para así obtener un valor óptimo para la tasa de reinicio, justo como se hizo en la sección 3.5. Para ello hay que reescalar la función en términos de u y una nueva variable β que contiene a las demás variables r , D y b ,

$$\beta = \frac{b\alpha_0}{2} \quad (4.41)$$

y dado que $a = 0$ la ecuación (4.17) se convierte en lo siguiente

$$\langle T_r(x_0) \rangle = \frac{b^2}{4D\beta^2} \left[\frac{\sinh 2\beta}{\sinh(2\beta - x_0\alpha_0) + \sinh(x_0\alpha_0)} - 1 \right] \quad (4.42)$$

es posible simplificar el problema con identidades trigonométricas

$$\begin{aligned} \frac{\sinh 2\beta}{\sinh(2\beta - x_0\alpha_0) + \sinh(x_0\alpha_0)} &= \frac{2 \sinh \beta \cosh \beta}{\sinh 2\beta \cosh x_0\alpha_0 - \cosh 2\beta \sinh x_0\alpha_0 - \sinh x_0\alpha_0} \\ &= \frac{2 \sinh \beta \cosh \beta}{2 \sinh \beta \cosh \beta \cosh x_0\alpha_0 - (1 + 2 \sinh^2 \beta) \sinh x_0\alpha_0 + \sinh(x_0\alpha_0)} \end{aligned}$$

que finalmente puede escribirse cómo

$$\langle T_r \rangle = \frac{b^2}{4D\beta^2} \left[\frac{\cosh \beta}{\cosh \beta(1 - 2u)} - 1 \right] \quad (4.43)$$

donde se define la función $\mathcal{G}(\beta, u) = (1/\beta^2) \left[\frac{\cosh \beta}{\cosh \beta(1 - 2u)} - 1 \right]$ de forma que el tiempo promedio de primer arribo es,

$$\langle T_r \rangle = \frac{b^2}{4D} \mathcal{G}(\beta, u), \quad (4.44)$$

para proseguir se puede minimizar respecto al parámetro β y así encontrar el valor β^* que minimiza el proceso, sin embargo, dado que existen 3 regímenes en la posición u definidas por el dominio \mathcal{D} el problema toma varias formas y no existe un solo valor β^* que minimiza el proceso, para esto véase la figura 15. Claramente puede verse que en el dominio $u < u_-$ existe un valor donde β alcanza un mínimo, β^* , sin embargo, en el dominio $u_- < u < u_+$ no se alcanza un mínimo y la función es monótonamente creciente, en cambio para el tercer dominio $u_+ < u$ hay un mínimo de β , pero debe prestarse atención a que la función tarda bastante en crecer, por lo que el valor de β^* que se encuentra en el primer dominio, eso es claro, entonces, ¿qué significa esto para el problema? Significa que el proceso puede completarse en un tiempo menor si se selecciona la posición adecuada de tal manera que no se coloque la partícula en al frontera y para el caso donde se encuentra entra ambos dominios solución resulta no existir un valor para r que beneficie al proceso de absorción.

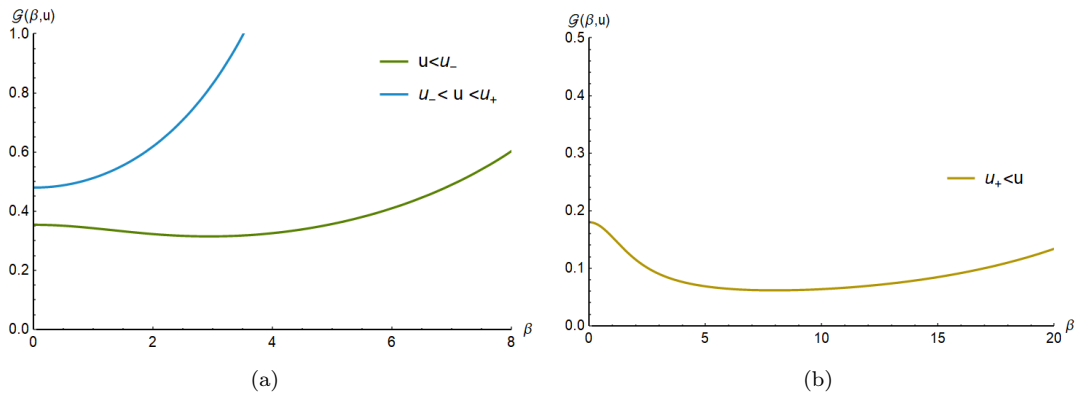


Figura 15: Comportamiento de la función $\mathcal{G}(\beta, u)$, en la figura a) para el dominio $u < u_-$ (línea verde) se ocupa un valor de $u = 0.23$ y en el dominio $u_- < u < u_+$ (línea azul) se utiliza un valor $u = 0.6$ y en la figura b) se muestra el comportamiento del dominio $u_+ < u$ (línea amarilla) cuando utiliza un valor de $u = 0.9$

4.5. Tiempo de primer arribo condicional

En el caso de arribo condicional se establecen dos procesos que pueden suceder, uno es el proceso *exitoso* y el proceso *fallido*. El primero consiste en que la partícula alcanza una frontera en específico, el segundo consiste en que la partícula alcance la frontera opuesta al proceso anterior. Bajo el análisis de este trabajo se considerara a la frontera *exitosa* a la frontera b y la frontera *fallida* a la frontera a , también, cabe destacar que del tiempo de arribo de ambos procesos poseen una tasa de éxito o fallo que viene descrita por la probabilidad de bifurcación, es decir, la probabilidad de que la partícula decida tomar un camino que la orille a escapar por una frontera en específico o dicho de otra manera la probabilidad de *éxito* o bien la probabilidad de *fallo*. Y sorpresivamente la inclusión de reinicio en ambos procesos permite optimizar cualquiera de los dos procesos a un máximo.

4.5.1. Tiempo medio de salida condicional

Es el tiempo promedio en el que la partícula alcance una frontera específica. Ahora bien, definiendo a $\langle T(x_0) \rangle_{\pm}$ como el tiempo medio de salida por las fronteras b y a , respectivamente para cada signo. Para calcular estos valores estadísticos se recurre al flujo probabilidad que los define, dado que

$$J(x, t) = -D \frac{\partial P_r(x, t | x_0)}{\partial x} \quad (4.45)$$

y el tiempo promedio de primer arribo puede escribirse en términos del flujo, así

$$\langle T_r(x_0) \rangle_{\pm} = \frac{\int_0^{\infty} t J_{\pm}(x_0, t) dt}{\int_0^{\infty} J_{\pm}(x_0, t) dt} \quad (4.46)$$

$J_{\pm}(x_0, t)$ denota el flujo existente por cada frontera, siendo respectivamente lo siguiente

$$\begin{aligned} J_+(x_0, t) &= -D \left. \frac{\partial P_r(x, t | x_0)}{\partial x} \right|_{x=b}, \\ J_-(x_0, t) &= D \left. \frac{\partial P_r(x, t | x_0)}{\partial x} \right|_{x=a}, \end{aligned} \quad (4.47)$$

los signos son contrarios debido a que se busca que el flujo tenga una dirección preferencial (véase la figura 16), y se justifica además en el hecho de que en la frontera b el flujo decrece y el flujo en la frontera a no disminuye.

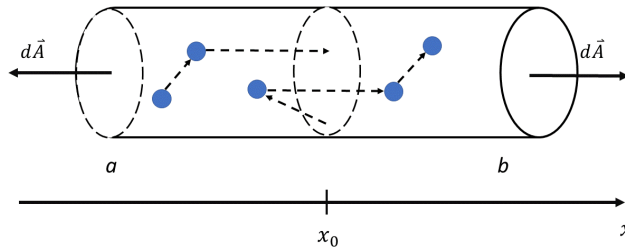


Figura 16: Esquemático del proceso de difusión, notese las direcciones de los vectores de superficie; su dirección resulta importante debido la cuantización del flujo por las fronteras a y b

Se pueden escribir las ecuaciones del tiempo promedio en el espacio de Laplace al hacer el límite donde $s \rightarrow 0$, dado que numerador cumple con lo siguiente

$$\int_0^{\infty} t J_{\pm}(x_0, t) dt = \int_0^{\infty} e^{-0t} t J_{\pm}(x_0, t) dt \quad (4.48)$$

que corresponde con la definición de la derivada de la transformada de Laplace, es decir

$$(-1)^n \frac{\partial^n \tilde{f}(x_0, s)}{\partial s^n} = \mathcal{L}\{t^n f(x_0, t)\}, \quad (4.49)$$

y para el denominador se tiene que

$$\int_0^{\infty} J(x_0, t) dt = \tilde{J}_{\pm}(x_0, s = 0), \quad (4.50)$$

con esto finalmente se tiene el tiempo promedio de primer arribo condicionado

$$\langle T_r(x_0) \rangle_{\pm} = \frac{-\left. \frac{\partial \tilde{J}_{\pm}(x_0, s)}{\partial s} \right|_{s \rightarrow 0}}{\tilde{J}_{\pm}(x_0, 0)}, \quad (4.51)$$

de forma que se cumple que

$$\begin{aligned} \tilde{J}_+(x_0, s) &= -D \left. \frac{\partial \tilde{P}_r(x, s|x_0)}{\partial x} \right|_{x=b} \\ \tilde{J}_-(x_0, s) &= D \left. \frac{\partial \tilde{P}_r(x, s|x_0)}{\partial x} \right|_{x=a} \end{aligned} \quad (4.52)$$

Al sustituir el valor de $\tilde{P}_r(x, s|x_0)$ en lo que se encontró en la ecuación (4.52) se obtiene lo siguiente para el flujo en $x = b$

$$\tilde{J}_+(x_0, s) = D\alpha^2 \frac{\sinh(x_0 - a)\alpha}{s \sinh(b - a)\alpha + r[\sinh(x_0 - a)\alpha + \sinh(b - x_0)\alpha_0]} \quad (4.53)$$

y para el flujo en a se tiene respectivamente lo siguiente

$$\tilde{J}_-(x_0, s) = D\alpha^2 \frac{\sinh(b - x_0)\alpha}{s \sinh(b - a)\alpha + r[\sinh(x_0 - a)\alpha + \sinh(b - x_0)\alpha_0]}. \quad (4.54)$$

Ahora bien, al tomar las derivadas respecto a la variable de Laplace y tomar el limite de $s \rightarrow 0$ es posible encontrar el tiempo promedio de salida por ambas fronteras. Desgraciadamente la expresión no tiene una forma compacta, entonces, para simplificar la notación se define entonces la función $\mathcal{W}(a_1, a_2, a_3)$, (véase el apéndice H para más detalles de la operación) específicamente

$$\begin{aligned} \mathcal{W}(a_1, a_2, a_3) &= -2 + \operatorname{csch}(\alpha_0 a_1) \{ \alpha_0 a_2 \cosh(\alpha_0 a_2) \\ &\quad + 2 \operatorname{senh}(\alpha_0 a_3) - [2 + \alpha_0 a_1 \coth(\alpha_0 a_1)] \operatorname{senh}(\alpha_0 a_2) \} \end{aligned} \quad (4.55)$$

de forma que los tiempos promedio son

$$\langle T_r(x_0) \rangle_+ = \frac{\mathcal{W}(x_0 - a, b - x_0, b - a)}{2D\alpha_0^2(1 + \operatorname{csc}(x_0 - a)\alpha_0 \operatorname{senh}(b - x_0)\alpha_0)} \quad (4.56)$$

$$\langle T_r(x_0) \rangle_- = \frac{\mathcal{W}(b - x_0, x_0 - a, b - a)}{2D\alpha_0^2(1 + \operatorname{csc}(b - x_0)\alpha_0 \operatorname{senh}(x_0 - a)\alpha_0)}. \quad (4.57)$$

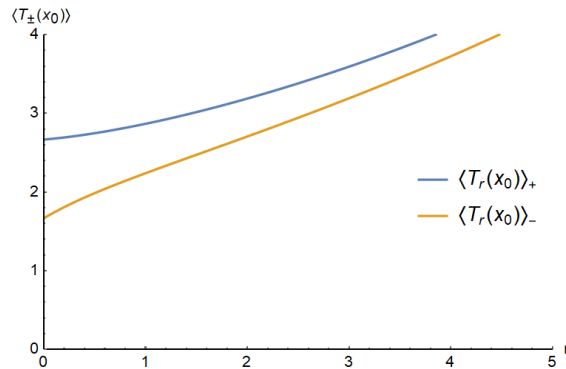


Figura 17: Gráfico del tiempo promedio de salida condicional $\langle T(x_0) \rangle_+$ (línea azul) y $\langle T(x_0) \rangle_-$ (línea amarilla) respectivamente. En ambas curvas se establecieron los valores $a = 0$ y $b = 3$ para la fronteras y $x_0 = 1$ para la posición inicial junto al valor de $D = 1/2$.

Debe recalarse que los tiempos de salida promedio son funciones dependientes de la tasa de reinicio r , además que ambas funciones divergen si la tasa de reinicio aumenta, (véase la figura 17). Entonces, si el comportamiento del tiempo de arribo no posee mínimos entonces hay que evaluar de una forma diferente el tiempo promedio de salida.

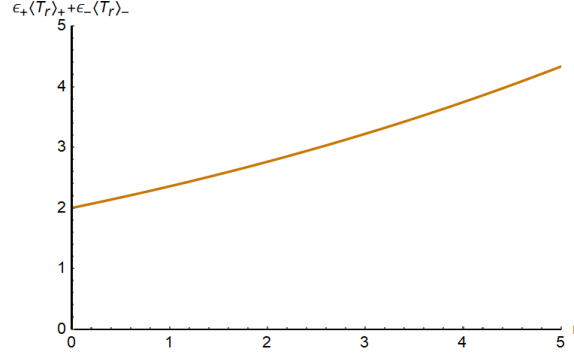


Figura 18: Comportamiento de la ecuación (4.69) cuando la función depende de r . En este caso los parámetros son $a = 0$, $b = 3$ y $D = 1/2$.

En el límite de $r \rightarrow 0$ se tiene el comportamiento del proceso sin reinicio, para encontrar un resultado importante es necesario reescribir el término $\sinh \alpha_0(b - a)$ como $\sinh \alpha_0(b - x_0 + x_0 - a)$ y desarrollar la suma de ángulos, acto seguido se hacen las aproximaciones hasta segundo orden para el seno y coseno hiperbólico, truncando a tercer orden una vez desarrollados los productos, de lo que se obtiene que

$$\langle T_0(x_0) \rangle_+ = \frac{(b - x_0)(b + x_0 - 2a)}{6D}, \quad (4.58)$$

$$\langle T_0(x_0) \rangle_- = \frac{(x_0 - a)(2b - x_0 - a)}{6D}. \quad (4.59)$$

Para más detalles de como se llega a estos resultados véase el apéndice I.

4.5.2. Probabilidad de bifurcación

La probabilidad de bifurcación describe el proceso de una partícula que empieza su proceso en x_0 y evoluciona en la caja de dimensiones $[a, b]$ de forma que alcanza la frontera b antes que la frontera a y viceversas. Ahora, estas probabilidades son representadas por la letra $\epsilon_{\pm}(x_0)$ donde el signo $+$ representa el proceso de alcanzar la frontera b y el signo $-$ el proceso de alcanzar la frontera a , justo como se ha trabajado hasta el momento. Es decir, representan procesos de *éxito* y *fallo* pero ahora describen la probabilidad con la que pueden ocurrir. El cálculo de estas probabilidades viene descrito por el flujo existente por cada frontera,

$$\epsilon_{\pm}(x_0) = \int_0^{\infty} J_{\pm}(x_0, t) dt = \tilde{J}_{\pm}(x_0, s = 0). \quad (4.60)$$

El valor de $\tilde{J}_{\pm}(x_0, s)$ se conoce de las ecuaciones (4.53) y (4.54) con el valor de $s = 0$, de forma que se obtienen las siguientes expresiones

$$\epsilon_+(x_0) = \frac{\sinh(x_0 - a)\alpha_0}{\sinh(x_0 - a)\alpha_0 + \sinh(b - x_0)\alpha_0}, \quad (4.61)$$

$$\epsilon_-(x_0) = \frac{\sinh(b - x_0)\alpha_0}{\sinh(x_0 - a)\alpha_0 + \sinh(b - x_0)\alpha_0}. \quad (4.62)$$

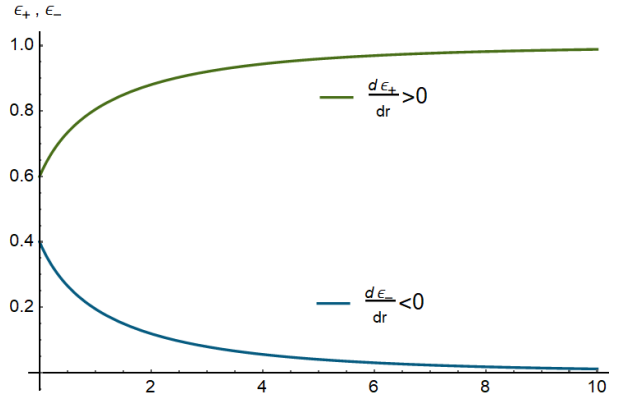


Figura 19: Gráfico de las probabilidades de bifurcación $\epsilon_+(x_0)$ (línea verde) y $\epsilon_-(x_0)$ (línea azul) como funciones de la tasa de reinicio. Los parámetros son: $a = 0$, $b = 5$, $x_0 = 3$ y $D = 1/2$.

Es posible hacer dos aproximaciones adicionales a ambas probabilidades y son $r \rightarrow 0$ y $r \rightarrow \infty$, ambas dando resultados interesantes, por ejemplo, en el primero las probabilidades de bifurcación se convierten en

$$\epsilon_+(x_0)|_{r \rightarrow 0} = \frac{x_0 - a}{b - a}, \quad (4.63)$$

$$\epsilon_-(x_0)|_{r \rightarrow 0} = \frac{b - x_0}{b - a}, \quad (4.64)$$

notese que en el caso donde $a = 0$ la suma de ambas probabilidades es igual a 1, se recupera una probabilidad binomial para el proceso difusivo. En cambio, en el caso de r muy grande, existe una fuerte dependencia de condiciones iniciales, por ejemplo si $x_0 > (b+a)/2$ se tiene que $b-x_0 < x_0-a$, entonces, en la forma exponencial de las probabilidades de bifurcación se encuentra

$$\epsilon_+ \left(x_0 > \frac{b+a}{2} \right) \Big|_{r \rightarrow \infty} = \frac{e^{(x_0-a)\alpha_0}}{e^{(x_0-a)\alpha_0} + e^{(b-x_0)\alpha_0}} = \frac{1}{1 + \frac{e^{(b-x_0)\alpha_0}}{e^{(x_0-a)\alpha_0}}} = 1, \quad (4.65)$$

$$\epsilon_+ \left(x_0 < \frac{b+a}{2} \right) \Big|_{r \rightarrow \infty} = \frac{e^{(b-x_0)\alpha_0}}{e^{(x_0-a)\alpha_0} + e^{(b-x_0)\alpha_0}} = \frac{1}{1 + \frac{e^{(x_0-a)\alpha_0}}{e^{(b-x_0)\alpha_0}}} = 0, \quad (4.66)$$

esto último debido a que $x_0 - a > b - x_0$. Y en el caso $x_0 < (b+a)/2$ los resultados son contrarios, es decir

$$\epsilon_+ \left(x_0 < \frac{b+a}{2} \right) \Big|_{r \rightarrow \infty} = \frac{e^{(x_0-a)\alpha_0}}{e^{(x_0-a)\alpha_0} + e^{(b-x_0)\alpha_0}} = \frac{1}{1 + \frac{e^{(b-x_0)\alpha_0}}{e^{(x_0-a)\alpha_0}}} = 0, \quad (4.67)$$

$$\epsilon_+ \left(x_0 > \frac{b+a}{2} \right) \Big|_{r \rightarrow \infty} = \frac{e^{(b-x_0)\alpha_0}}{e^{(x_0-a)\alpha_0} + e^{(b-x_0)\alpha_0}} = \frac{1}{1 + \frac{e^{(x_0-a)\alpha_0}}{e^{(b-x_0)\alpha_0}}} = 1. \quad (4.68)$$

Estos resultados indican que eventualmente la partícula alcanzará la frontera b en lugar de la frontera a si $x_0 > (b+a)/2$ y viceversa si $x_0 < (b+a)/2$. Y al usar el valor de $x_0 = (b+a)/2$ las probabilidades son $\epsilon_+ = \epsilon_- = 1/2$ sin importar la tasa de reinicio que se elija, grande o pequeña, en la figura 18 se puede ver más claramente este comportamiento.

Es posible encontrar la relación entre ambos procesos de arribo (condicional e incondicional), para ello hay que desarrollar la siguiente suma,

$$\epsilon_+ \langle T_r \rangle_+ + \epsilon_- \langle T_r \rangle_- \quad (4.69)$$

que gracias a las ecuaciones (4.56), (4.57), (4.59) y (4.59) se encuentra

$$\epsilon_+ \langle T_r \rangle_+ = \frac{\sinh^2(x_0 - a)\alpha_0}{2D\alpha_0^2} \frac{\mathcal{W}_1(x_0 - a, b - x_0, b - a)}{[\sinh(x_0 - a)\alpha_0 + \sinh(b - x_0)\alpha_0]}$$

$$\epsilon_- \langle T_r \rangle_- = \frac{\sinh^2(b-x_0)\alpha_0}{2D\alpha_0^2} \frac{\mathcal{W}_1(b-x_0, x_0-a, b-a)}{[\sinh(x_0-a)\alpha_0 + \sinh(b-x_0)\alpha_0]}$$

ambas expresiones desarrolladas no se simplifican en nada, al menos por si mismas, sin embargo juntas si, entonces, al sumar ambas relaciones se llega a lo siguiente

$$\begin{aligned} \epsilon_+ \langle T_r \rangle_+ + \epsilon_- \langle T_r \rangle_- &= \frac{1}{2D\alpha_0^2} \frac{-2[\sinh(x_0-a)\alpha_0 + \sinh(b-x_0)\alpha_0]^2}{[\sinh(x_0-a)\alpha_0 + \sinh(b-x_0)\alpha_0]^2} \\ &+ \frac{1}{2D\alpha_0^2} \frac{2\sinh(b-x_0)\alpha_0}{[\sinh(x_0-a)\alpha_0 + \sinh(b-x_0)\alpha_0]^2} \end{aligned}$$

que es posible reescribirlo como,

$$\epsilon_+ \langle T_r \rangle_+ + \epsilon_- \langle T_r \rangle_- = \frac{1}{r} \left[\frac{\sinh(b-a)\alpha_0}{\sinh(x_0-a)\alpha_0 + \sinh(b-x_0)\alpha_0} - 1 \right]$$

que es el tiempo promedio de arribo incondicional, por lo tanto se encuentra la relación

$$\langle T_r(x_0) \rangle = \epsilon_+ \langle T_r \rangle_+ + \epsilon_- \langle T_r \rangle_- . \quad (4.70)$$

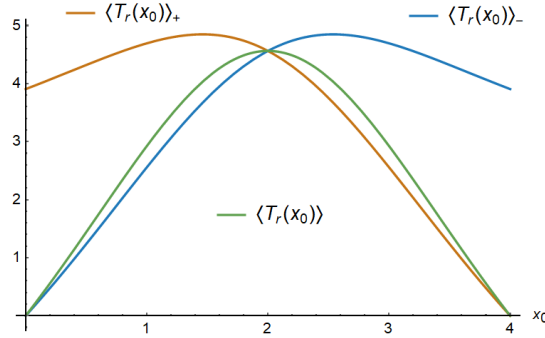


Figura 20: Comparativa del tiempo promedio de arribo incondicional $\langle T_r(x_0) \rangle$ (línea verde) con los tiempos promedio de salida condicional $\langle T_r(x_0) \rangle_+$ (línea naranja) y $\langle T_r(x_0) \rangle_-$ (línea azul) como funciones de la posición x_0 ; los parámetros utilizados son $a = 0$, $b = 4$, $D = 1/2$. Notese que las funciones se intersectan en $(b+a)/2$, es decir $x_0 = 2$.

Cabe resaltar que esta ecuación es válida para cualquier valor de r . Lo cual significa que el tiempo promedio de arribo incondicional (de forma aproximada) está determinado por el tiempo promedio de salida condicional de cada frontera. Para visualizar cómo ocurre esto véase la figura 20. También es posible realizar este análisis mediante pesos de las trayectorias, es decir, la probabilidad de bifurcación $\epsilon_+(x_0)$ es el resultado de la suma de todas las trayectorias que comienzan en la posición x_0 y salen por la frontera b sin tocar la frontera a . Entonces, con esto, es posible definir lo siguiente

$$\epsilon_+(x_0) = \sum \sigma_{p_+}(x_0), \quad (4.71)$$

donde $\sigma_{p_+}(x_0)$ denota el peso que tiene una sola trayectoria de la posición x_0 a la posición b evitando a la frontera a en el proceso. Por otra parte, el tiempo promedio de salida condicional $\langle T_r(x_0) \rangle_+$ también puede ser pesado por las trayectorias definidas anteriormente, dado que es el mismo proceso en sí, entonces

$$\langle T_r(x_0) \rangle_+ = \frac{\sum \sigma_{p_+}(x_0) t_{p_+} x_0}{\sum \sigma_{p_+}(x_0)}, \quad (4.72)$$

donde $t_{p_+}(x_0)$ es el tiempo que tarda una trayectoria específica en atravesar la frontera b , siendo que su posición inicial es x_0 . Estos mismos argumentos formulan a la probabilidad de bifurcación $\epsilon_-(x_0)$ y $\langle T_r(x_0) \rangle_+$,

$$\epsilon_-(x_0) = \sum \sigma_{p_-}(x_0), \quad (4.73)$$

$$\langle T_r(x_0) \rangle_- = \frac{\sum \sigma_{p_-}(x_0) t_{p_-} x_0}{\sum \sigma_{p_-}(x_0)}, \quad (4.74)$$

donde los términos $\sigma_{p_-}(x_0)$ y $t_{p_-}(x_0)$ representan lo mismo, solo que ahora la trayectoria es una que empieza en x_0 y alcanza la frontera a .

Es importante notar que los tiempos promedio de salida pueden ser funciones de r o bien de x_0 , esto puede verse en las figuras 17 y 20. Por ejemplo, si $x_0 = (b+a)/2$ (el punto medio del intervalo) ocasiona que ambos tiempos promedio de salida condicional sean iguales, para ello debe notarse primero que $b - x_0 = x_0 - a = (b-a)/2$, por lo que la función $\mathcal{W}(a_1, a_2, a_3)$ utilizada en las ecuaciones (4.56) y (4.57) coinciden en el resultado, de forma que ahora es

$$\begin{aligned}\mathcal{W}\left(\frac{b-a}{2}, \frac{b-a}{2}, b-a\right) &= -2 + \alpha_0 \left(\frac{b-a}{2}\right) \operatorname{csch}\left(\alpha_0 \frac{b-a}{2}\right) \cosh\left(\alpha_0 \frac{b-a}{2}\right) \\ &\quad + 2 \sinh \alpha_0 (b-a) \operatorname{csch}\left(\alpha_0 \frac{b-a}{2}\right) - 2 \operatorname{csch}\left(\alpha_0 \frac{b-a}{2}\right) \sinh\left(\alpha_0 \frac{b-a}{2}\right) \\ &\quad - \alpha_0 \left(\frac{b-a}{2}\right) \cosh\left(\alpha_0 \frac{b-a}{2}\right) \operatorname{csch}\left(\alpha_0 \frac{b-a}{2}\right) \\ \mathcal{W}\left(\frac{b-a}{2}, \frac{b-a}{2}, b-a\right) &= -4 + 2 \sinh \alpha_0 (b-a) \operatorname{csch}\left(\alpha_0 \frac{b-a}{2}\right) = -4 + 4 \cosh\left(\alpha_0 \frac{b-a}{2}\right)\end{aligned}$$

y puede ser aún más simplificada,

$$\mathcal{W}\left(\frac{b-a}{2}, \frac{b-a}{2}, b-a\right) = 8 \sinh^2\left(\alpha_0 \frac{b-a}{4}\right) \quad (4.75)$$

y dado que el denominador de las funciones de tiempo promedio de salida es el mismo se encuentra entonces que

$$\langle T_r(x_0) \rangle_+ = \langle T_r(x_0) \rangle_- = \frac{8}{4r} \sinh^2 \alpha_0 \left(\frac{b-a}{4}\right). \quad (4.76)$$

Si se hace la misma sustitución del valor de x_0 en la ecuación (4.70) es posible encontrar el mismo valor para el tiempo de arribo incondicional

$$\langle T_r(x_0) \rangle = \frac{2}{r} \sinh^2 \alpha_0 \left(\frac{b-a}{4}\right), \quad (4.77)$$

esto ultimo es muy relevante debido a que de esta manera ambos procesos, condicional e incondicional se simplifican al mismo resultado si se elige la posición adecuada. Nuevamente con esto se demuestra que el problema es muy sensible a condiciones iniciales, haciendo así que un cambio en la posición genere un problema totalmente distinto a resolver. Más aún, si interesa que la partícula sea absorbida por cualquiera de las dos fronteras se tiene directamente que $\langle T_r(x_0 = a) \rangle = \langle T_r(x_0 = b) \rangle = 0$, sin embargo en el caso de salida condicional se tiene que $\langle T_r(x_0 \rightarrow a) \rangle_+ \neq 0$, esto no intuitivo de primera mano. Esto ocurre debido a que el proceso denotado por $\langle T_r(x \rightarrow a) \rangle_+$ condiciona a la partícula a sobrevivir a la frontera a incluso si ha empezado muy cerca de ella. Claramente existen trayectorias que tienen este comportamiento y además cumplen el cruzar la otra frontera, contribuyendo así a $\langle T_r(x_0) \rangle_{\pm}$ dependiendo del proceso que se este analizando, dado que también se cumple en el caso de $\langle T_r(x_0 \rightarrow b) \rangle_- \neq 0$. Esto significa que los límites son simétricos, entonces ambos procesos deben seguir el mismo comportamiento si la posición inicial se aproxima a la frontera por la cual no esta condicionada a salir; esto es posible demostrarlo, para ello se reescribe la función $\langle T_r(x_0 \rightarrow a) \rangle_+$ de la siguiente manera,

$$\langle T_r(x_0 \rightarrow a) \rangle = \frac{\sinh \alpha_0 (x_0 - a)}{2r} \frac{\mathcal{W}(x_0 - a, b - x_0, b - a)}{\sinh \alpha_0 (x_0 - a) + \sinh \alpha_0 (b - x_0)}$$

ahora bien, se toma un primer limite, donde $\alpha_0(x_0 - a)$ es pequeño, esto modifica a la función \mathcal{W} como

$$\begin{aligned}\mathcal{W}(x_0 - a, b - x_0, b - a) &= -2 + \frac{1}{\alpha_0(x_0 - a)} [\alpha_0(b - x_0) \cosh \alpha_0(b - x_0) + 2 \sinh \alpha_0(b - a) \\ &\quad - 2 \sinh \alpha_0(b - x_0) - \sinh \alpha_0(b - x_0)]\end{aligned}$$

y al aplicar el mismo limite al denominador de la función $\langle T_r(x \rightarrow a) \rangle_+$ se obtiene

$$2r[\alpha_0(x_0 - a) + \sinh \alpha_0(b - x_0)]$$

con esto se procede a unir resultados,

$$\langle T_r(x \rightarrow a) \rangle_+ = \frac{\frac{\alpha_0(x_0 - a)}{2r} \left\{ -2 + \frac{\alpha_0(b - x_0) \cosh \alpha_0(b - x_0) + 2 \sinh \alpha_0(b - a) - 3 \sinh \alpha_0(b - x_0)}{\alpha_0(x_0 - a)} \right\}}{\alpha_0(x_0 - a) + \sinh \alpha_0(b - x_0)}$$

ahora se aplica el limite de $x_0 \rightarrow a$, con lo que el resultado se simplifica enormemente en

$$\langle T_r(x \rightarrow a) \rangle_+ = \frac{\alpha_0(b - a) \coth \alpha_0(b - a) - 1}{2r}. \quad (4.78)$$

También se puede obtener el mismo resultado en el caso donde $x_0 \rightarrow b$ en la función $\langle T_r(x_0 \rightarrow b) \rangle_-$ al realizar los mismos pasos que en el caso de $x_0 \rightarrow a$. Esto puede verse claramente en la figura 20, ambas funciones tienden al mismo valor cuando se acercan al valor de sus fronteras por las que no pueden cruzar.

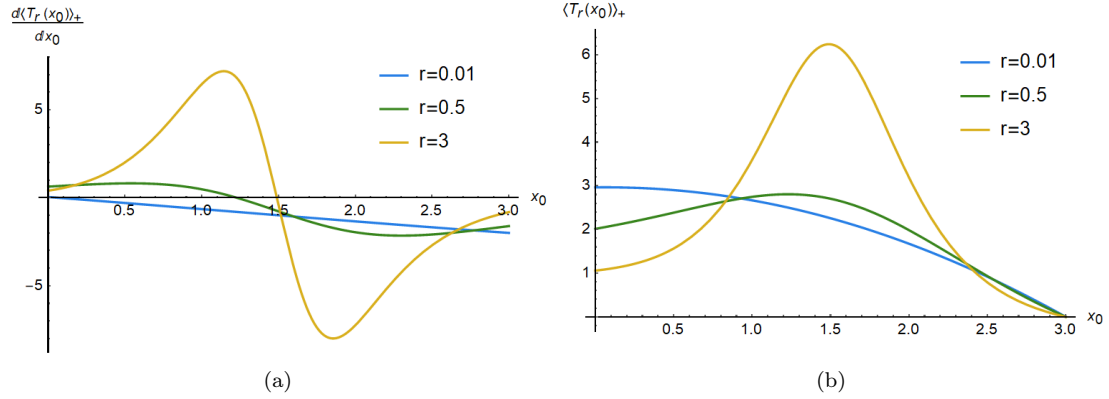


Figura 21: a) Comportamiento de la función $\mathcal{P}(x_0, r)$ respecto a la posición x_0 (con $a = 0$, $b = 3$ y $D = 1/2$) para tres valores diferentes de la tasa de reinicio, $r = 0.01$ (línea azul), $r = 0.5$ (línea verde) y $r = 3$ (línea amarilla). b) Gráfica del tiempo promedio de salida condicional para los mismos valores de r establecidos en el inciso a). Notese que el valor alto de la tasa de reinicio r hace que la curva se asemeje más al tiempo promedio de salida incondicional $\langle T_r(x_0) \rangle$.

Al visualizar con más detenimiento la figura 20 es posible detectar que las funciones $\langle T_r(x_0) \rangle_{\pm}$ son funciones no monótonas respecto a la posición x_0 . Entonces, para entender como funciona la razón de cambio se recurre a la pendiente de la función,

$$\mathcal{P}(x_0, r) = \frac{d\langle T_r(x_0) \rangle_{\pm}}{dr}. \quad (4.79)$$

Se busca analizar a la función $\mathcal{P}(x_0, r)$ como función de x_0 y r como un parámetro variable. Dado que la función en su forma explícita no tiene una forma simplificada se recurre a métodos gráficos para demostrar como la tasa de reinicio r cambia la tendencia de la pendiente de positivo a negativo. Esto ultimo puede verse en la figura 21a; mientras el valor de r es pequeño la razón de cambio respecto a x_0 siempre es negativa, por lo que mientras más se acerca a la frontera b el proceso termina con mayor facilidad. Al derivar la ecuación (??) respecto a x_0 se encuentra la relación que denota este comportamiento,

$$\mathcal{P}(x_0, r \rightarrow 0) = \frac{(a - x_0)}{3D}. \quad (4.80)$$

En cambio, mientras el valor de la tasa de reinicio aumenta se generan cambios en la tendencia de la pendiente, haciendo que esta pase de positiva a negativa. Esto genera que existan dominios

donde el proceso se alarga ($a < x < (b+a)/2$) o bien se acorta ($(b+a)/2 < x < b$), para visualizar esto basta con revisar el comportamiento del tiempo promedio de salida condicional para diferentes valores de r , esto ultimo se presenta en la figura 21b. Notese que el valor máximo del tiempo promedio arribo condicional se alcanza en el punto medio del domino $x_0 = (b+a)/2$ (esto se cumple únicamente si la tasa de reinicio r es grande), la razón de este comportamiento se debe a que si se encuentra en el punto medio la partícula tiene probabilidad de moverse a la izquierda tanto a la derecha, pero las trayectorias que se desarrollan en el dominio $a < x < (a+b)/2$ están condicionadas a no tocar la frontera a por lo que el tiempo promedio de salida condicional se extiende buscando la frontera b .

4.5.3. Optimización de las probabilidades de éxito y fallo

Como se ha podido ver a lo largo de los capítulos es posible optimizar los procesos de primer arribo y los procesos de salida condicional no son la excepción. Para ello es necesario definir las funciones T_0^+ y T_0^- como los tiempos de salida promedio condicional (por la frontera b y la frontera a , respectivamente) junto a la función T_0 que representa el tiempo de salida incondicional en ausencia de reinicio. También se define la función densidad por $f_{T_0}(t) = -\frac{dQ_0(x_0, t)}{dt}$ con $Q_0(x_0, t)$ como la probabilidad de supervivencia en ausencia de reinicio definida con anterioridad. Al usar esta ultima definición es posible encontrar su transformada de Laplace con una nueva variable de Laplace λ ,

$$\tilde{T}_0(\lambda) = \int_0^\infty e^{-\lambda t} f_{T_0} dt$$

que es equivalente a

$$\tilde{T}_0(\lambda) = \frac{2 \sum_{n=1}^\infty k_n \Phi(n) \psi(x_0) e^{-k_n t}}{k_n + \lambda} \quad (4.81)$$

donde $k_n = n^2 \pi^2 D / (b-a)^2$. Ahora, si se desea hacer el calculo de las densidades de tiempo en el espacio de Laplace basta con seguir el mismo procedimiento marcado arriba

$$\tilde{T}_0^\pm(\lambda) = \int_0^\infty e^{-\lambda t} f_{T_0^\pm}(t), \quad (4.82)$$

es posible relacionar los procesos de salida condicional e incondicional al hacer unas cuantas modificaciones a la probabilidad de bifurcación, primero se recuerda que, por definición

$$\epsilon_+(x_0) = \int_0^\infty J_+(x_0, t) dt = \tilde{J}_+(x_0, s \rightarrow 0)$$

y a su vez que el flujo en el espacio de Laplace es

$$\tilde{J}(x_0, s) = -D \left. \frac{\partial \tilde{P}_r(x, s|x_0)}{\partial x} \right|_{x=b}$$

que es posible reescribir gracias a que se conoce la forma explicita de $\tilde{P}(x, s|x_0)$, para ello note que

$$\tilde{P}(x, s|x_0) = \frac{\tilde{P}_0(x, s+r|x_0)}{1 - r\tilde{Q}_r(x_0, s+r)}$$

entonces, como la derivada es únicamente respecto a x es posible llegar a que

$$\tilde{J}(x_0, s) = \frac{1}{1 - r\tilde{Q}_0(x_0, s+r)} \left[-D \left. \frac{\partial \tilde{P}_0(x, s+r|x_0)}{\partial x} \right|_{x=b} \right] \quad (4.83)$$

además, si $s \rightarrow 0$ se tiene una expresión alterna del flujo y de la probabilidad de bifurcación

$$\epsilon_+(x_0) = \tilde{J}_+(x_0, 0) = \frac{1}{1 - r\tilde{Q}_0(x_0, r)} \left[-D \left. \frac{\partial \tilde{P}_0(x, r|x_0)}{\partial x} \right|_{x=b} \right]. \quad (4.84)$$

Ahora, la transformada de Laplace del tiempo promedio de salida del proceso incondicional es

$$\tilde{T}_0(r) = \int_0^\infty e^{-rt} \left[-\frac{\partial Q_0(x_0, t)}{\partial t} \right] dt, \quad (4.85)$$

esta ultima integral puede expresarse en términos de $\tilde{Q}_0(x_0, s)$, solo es necesario integrar por partes además de recordar la condición inicial; $Q_0(x_0, 0) = 1$,

$$\tilde{T}_0(r) = 1 - r\tilde{Q}_0(x_0, s). \quad (4.86)$$

Siguiendo la misma linea para el flujo por la frontera b en ausencia de reinicio se encuentra

$$\tilde{J}_+^0(x_0, r) = \int_0^\infty e^{-rt} J_+^0(x_0, t) dt, \quad (4.87)$$

es posible escribir esta ecuación en función de las densidades temporales de los procesos condicionales con el siguiente cambio,

$$f_{T_0^\pm}(t) = -\frac{\partial Q_0(x_0, t)}{\partial t} = -D \frac{\partial^2 Q_0(x_0, t)}{\partial x^2} \quad (4.88)$$

esto ultimo gracias a la ecuación de difusión. Después se recurre a la definición antes establecida de la probabilidad de supervivencia $Q_0(x_0, t) = \int_a^b P_0(x, t, x_0) dx$, entonces después de anular una derivada se relacionan las funciones de densidad temporal $f_{T_0^\pm}(t)$ con los flujos de probabilidad de cada frontera. Cambiando así la ecuación (4.87) en

$$\tilde{J}_+^0(x_0, r) = \int_0^\infty e^{-rt} \left[-D \frac{\partial P_0(x, t|x_0)}{\partial x} \Big|_{x=b} \right] dt = \left[-D \frac{\partial \tilde{P}_0(x, r|x_0)}{\partial x} \Big|_{x=b} \right], \quad (4.89)$$

con lo que se comprueba entonces que el tiempo de salida condicional en el espacio de Laplace es equivalente al flujo en el mismo espacio

$$\tilde{T}_0^+(r) = \int_0^\infty e^{-rt} f_{T_0^+} dt = \tilde{J}_+^0(x_0, r) = \left[-D \frac{\partial \tilde{P}_0(x, r|x_0)}{\partial x} \Big|_{x=b} \right]. \quad (4.90)$$

Al sustituir los resultados de las ecuaciones (4.86) y (4.90) en la ecuación (4.84) se encuentra finalmente

$$\epsilon_+(x_0) = \frac{\tilde{T}_0^+(r)}{\tilde{T}_0(r)}, \quad (4.91)$$

esto es igual de valido para la probabilidad de bifurcación $\epsilon_-(x_0)$.

Con lo desarrollado hasta el momento se ha podido ver que las probabilidades de bifurcación son bastante relevantes para el análisis del proceso de salida condicional, por lo que son funciones que a primera vista permitirán optimizar los procesos de salida, esto último es posible y para demostrarlo se hace uso de la ecuación de renovación, pero ahora para el flujo $J_+(x_0, t)$,

$$J_+(x_0, t) = e^{-rt} J_+^0(x_0, t) + r \int_0^\infty e^{-r\tau} J_+^-(x_0, \tau) Q_r(x_0, t - \tau) d\tau. \quad (4.92)$$

Los términos en esta ecuación siguen la misma directriz que en el caso de la probabilidad de supervivencia. como es usual se aplica la transformada de Laplace para desarrollar más contenido de esta ecuación,

$$\begin{aligned} \tilde{J}_+(x_0, s) &= \tilde{J}_+^0(x_0, s+r) + r\tilde{J}_+^-(x_0, s+r)\tilde{Q}_r^+(x_0, s) \\ \tilde{J}_+(x_0, s) &= \tilde{J}_+^0(x_0, s+r)[1 + r\tilde{Q}_r^+(x_0, s)] \end{aligned} \quad (4.93)$$

que en términos de la probabilidad de supervivencia sin reinicio es

$$\begin{aligned} \tilde{J}_+(x_0, s) &= \tilde{J}_+^0(x_0, s+r) \left[\frac{1 - r\tilde{Q}_0(x_0, s+r) + r\tilde{Q}_0(x_0, s+r)}{1 - r\tilde{Q}_0(x_0, s+r)} \right] \implies \\ \tilde{J}_+(x_0, s) &= \frac{\tilde{J}_+^0(x_0, s+r)}{1 - r\tilde{Q}_0(x_0, s+r)} \end{aligned} \quad (4.94)$$

esto último gracias a la ecuación (4.10). Para proseguir debe notar que el tiempo promedio de salida condicional se puede escribir como

$$\langle T_r(x_0) \rangle_+ = \left. - \frac{\partial \tilde{J}_+(x_0, s)}{\partial s} \right|_{s \rightarrow 0} = - \frac{\partial}{\partial s} \ln \tilde{J}_+(x_0, s) \Big|_{s \rightarrow 0} \quad (4.95)$$

entonces, al sustituir al forma del flujo $\tilde{J}_+(x_0, s)$ en la ecuación anterior se obtiene

$$\langle T_r(x_0) \rangle_+ = - \left[\frac{\partial}{\partial s} \ln \tilde{J}_+^0(x_0, s) \right]_{s \rightarrow 0} + \left[\frac{\partial}{\partial s} \ln (1 - r \tilde{Q}_r(x_0, r + s)) \right]_{s \rightarrow 0}. \quad (4.96)$$

El último término a la derecha resulta interesante, dado que se puede relacionar cambiar la función de derivación, pero primero debe desarrollarse la derivada del logaritmo,

$$\frac{\partial}{\partial s} \ln (1 - r \tilde{Q}_0(x_0, s + r)) \Big|_{s \rightarrow 0} = - \frac{r}{1 - r \tilde{Q}_0(x_0, s + r)} \frac{\partial}{\partial s} \tilde{Q}_0(x_0, s + r) \Big|_{s \rightarrow 0}$$

el último término puede escribirse como la transformada de Laplace de la función $te^{-rt}Q_0(x, t)$, lo que implica necesariamente que

$$\int_0^\infty e^{-(s+r)t} t \tilde{Q}_0(x_0, t) dt = - \frac{d \tilde{Q}_0(x_0, s + r)}{d(s + r)}$$

pero al aplicar el límite se obtiene finalmente que

$$\frac{\partial}{\partial s} \ln (1 - r \tilde{Q}_0(x_0, s + r)) \Big|_{s \rightarrow 0} = - \frac{r}{1 - r \tilde{Q}_0(x_0, r)} \frac{d \tilde{Q}_0(x_0, r)}{dr}. \quad (4.97)$$

Este resultado cobrará más importancia en unos momentos.

Ahora, usando las relaciones existentes entre el flujo y el tiempo promedio de salida condicional en el espacio de Laplace, $\tilde{T}_0^+(s) = \tilde{J}_+^0(x_0, s)$, que también cumple con $\tilde{T}_0^+(s) = \tilde{J}_+^0(x_0, s + r)|_{s \rightarrow 0}$ se tiene que la derivada debe ser

$$\frac{\partial \tilde{J}_+^0(x_0, s + r)}{\partial s} \Big|_{s \rightarrow 0} = \frac{d}{dr} \tilde{T}_0^+(r). \quad (4.98)$$

y gracias a la ecuación (4.86) se puede calcular la derivada de la función \tilde{T}_+^0

$$\frac{d \tilde{T}_0^0}{dr} = - \tilde{Q}_0(x_0, r) - r \frac{d \tilde{Q}_0(x_0, r)}{dr}.$$

Al sustituir este resultado en la ecuación (4.97) se tiene que

$$\frac{\partial}{\partial s} \ln (1 - r \tilde{Q}_0(x_0, s + r)) \Big|_{s \rightarrow 0} = \frac{1}{\tilde{T}_0^0} \left[\tilde{Q}_0(x_0, r) + \frac{d \tilde{T}_0^0}{dr} \right]. \quad (4.99)$$

De esta manera se tiene todo lo necesario para relacionar el tiempo promedio de arribo condicional con los tiempos de salida promedio junto a la probabilidad de supervivencia

$$\langle T_r(x_0) \rangle_+ = - \frac{d}{dr} \ln \tilde{T}_0^+(r) + \frac{1}{\tilde{T}_0^+(r)} \left[\tilde{Q}_0(x_0, r) + \frac{d \tilde{T}_0^+(r)}{dr} \right]$$

$$\langle T_r(x_0) \rangle_+ = - \frac{d}{dr} \ln \tilde{T}_0^+(r) + \frac{1}{\tilde{T}_0^+(r)} \left[\tilde{Q}_0(x_0, r) + \frac{d \tilde{T}_0^+(r)}{dr} \right]$$

$$\langle T_r(x_0) \rangle_+ = \frac{\tilde{Q}_0(x_0, r)}{\tilde{T}_0^+(r)} - \frac{d}{dr} \ln \frac{\tilde{T}_0^+(r)}{\tilde{T}_0^+(r)}$$

$$\langle T_r(x_0) \rangle_+ = \frac{\tilde{Q}_0(x_0, r)}{1 - r\tilde{Q}_0(x_0, r)} - \frac{d}{dr} \ln \frac{\tilde{T}_0^+(r)}{\tilde{T}_0(r)} \quad (4.100)$$

donde es necesario recordar que $\langle T_r(x_0) \rangle = \tilde{Q}_r(x_0, 0) = \tilde{Q}_0(x_0, r)/(1 - r\tilde{Q}_0(x_0, r))$ y que $\epsilon_+(x_0) = \tilde{T}_0^+(r)/\tilde{T}_0(r)$ es decir la ecuación (4.27) y la ecuación (4.91) respectivamente, esto para simplificar la ecuación en

$$\langle T_r(x_0) \rangle_+ = \langle T_r(x_0) \rangle - \frac{1}{\epsilon_+(x_0)} \frac{d}{dr} \epsilon_+(x_0). \quad (4.101)$$

La ecuación anterior es muy importante, dado que se visualiza de primera mano como es que el reinicio afecta al tiempo promedio de salida condicional (por cualquier frontera). Por ejemplo si $d\epsilon_+(x_0)/dr > 0$ implicaría directamente que $\langle T_r(x_0) \rangle_+ < \langle T_r(x_0) \rangle$ lo cual significa que es posible minimizar el tiempo promedio de salida por la frontera b al escoger un valor adecuado para la tasa de reinicio. Por otra parte, puede verse claramente que en el caso de la probabilidad de bifurcación $\epsilon_-(x_0)$ la cosa cambia dado que $d\epsilon_-(x_0)/dr < 0$ entonces se tiene que $\langle T_r(x_0) \rangle_- > \langle T_r(x_0) \rangle$. Esto significa que que el tiempo promedio de salida por la frontera a en general es más grande, por lo que la probabilidad de que la partícula sea absorbida por la frontera es menor, y al modificar el valor de reinicio para alargar este proceso se aumenta la probabilidad de que sea absorbida por la otra frontera.

Con esto se puede ver que la selección apropiada de parámetros para los procesos de arribo condicional e incondicional pueden reducirse al regular la tasa de reinicio del proceso para así optimizar el mismo. Queda claro que al ser un proceso estocástico se tiene la probabilidad de que hayan comportamientos que no puedan ser descritos en su totalidad con análisis aquí presentado, dado que siempre existen eventualidades que no se captaron desde un primer momento.

5. Conclusiones

El proceso de difusión con reinicio tiene un amplio espectro de aplicaciones, aunque su estudio es complicado, en el presente trabajo se plantean las bases de la difusión y difusión con reinicio que permiten una mejor introducción al desarrollo al mismo.

La principal dificultad de la difusión con reinicio recae darle un tratamiento probabilístico adecuado, además de encontrar las limitantes que este modelo posee. Ya que el tratamiento en presencia de un blanco absorbente (el tema a seguir en la segunda parte de este trabajo) tiene soluciones únicamente aproximadas cuando $x_0 \neq X_r$, en caso contrario las soluciones y modelados posteriores se simplifican, a costo de perder un poco de generalidad en el proceso, sin embargo sigue siendo una buena aproximación.

Ahora bien, el reinicio puede derivar en tres cosas, alargar el proceso, dejarlo inalterado u optimizarlo. El cómo puede usarse el reinicio para que ocurra cualquiera de estos tres escenarios varía según de acuerdo a las características del sistema donde ocurre la difusión. Esto no solo por el dominio D de las posiciones a las que puede acceder la partícula si no por las condiciones de frontera que presente el problema. Dado que gracias a ellas cambia la forma de interpretar el problema y por ende considerar así nuevos parámetros que describan al problema, justo como se hace con la longitud del sistema (sección 2.5) o bien la posición de las fronteras (sección 3 y 4). Sin mencionar que esas no son todas las formas de cambiar la estructura del problema, también pueden existir blancos absorbentes (o no absorbentes) distribuidos por el dominio que fluctúan en el tiempo, generando así escenarios más generales.

El presente trabajo muestra una forma en la que se pueden entender los procesos de búsqueda bajo reinicio, y aunque no se introdujo el formalismo de los procesos biológicos al menos se tiene una idea de lo complejo que llega a ser la descripción de los mismos. Además de servir cómo una herramienta introductoria para entenderlos y por ende mejorar la percepción de la física y matemática que rodea a los sistemas biológicos.

A. Desarrollo de la ecuación (2.10) a la ecuación (2.11)

Ya en el continuo se requiere que Δx y Δt sean tan pequeños que tiendan a cero, hacer un desarrollo en serie para ambos lados de la ecuación (2.10) dará un resultado aproximado, es decir,

para el lado izquierdo se tiene lo siguiente

$$p(x, t + \Delta t) \approx p(x, t) + \Delta t \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2!} \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial t^2} + \dots, \quad (\text{A.1})$$

y para el lado derecho se tiene que

$$p(x \pm \Delta x, t) \approx p(x, t) \pm \Delta x \frac{\partial p(x, t)}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} + \dots, \quad (\text{A.2})$$

Al sustituir la ecuación (A.1) hasta orden lineal y la (A.2) hasta el orden cuadrático en la ecuación (2.10) da cómo resultado lo siguiente:

$$p(x, t) + \Delta t \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = (a + b) \left[p(x, t) + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} \right] + (a - b) \left[\Delta x \frac{\partial p(x, t)}{\partial x} \right]. \quad (\text{A.3})$$

Se recuerda la condición establecida anteriormente, es decir, $1 = a + b$,

$$\begin{aligned} \Delta t \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} &= \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} + (a - b) \Delta x \frac{\partial p(x, t)}{\partial x}, \\ \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} &= \frac{\Delta x^2}{2\Delta t} \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} + \frac{\Delta x(a - b)}{\Delta t} \frac{\partial p(x, t)}{\partial x}, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

se definen las siguientes funciones, resultado de un tratamiento estadístico no trivial, (apéndice B),

$$D \equiv \lim_{\substack{\Delta x \rightarrow 0 \\ \Delta t \rightarrow 0}} \frac{\Delta x^2}{2\Delta t}, \quad (\text{A.5})$$

$$\nu \equiv - \lim_{\substack{\Delta x \rightarrow 0 \\ \Delta t \rightarrow 0}} (a - b) \frac{\Delta x}{\Delta t}, \quad (\text{A.6})$$

dando como resultado en la ecuación (2.11)

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} - \nu \frac{\partial p(x, t)}{\partial x}. \quad (\text{A.7})$$

B. Justificación de la constante de difusión

Para la ecuación de difusión se recurre a la descripción de un camino al azar, para eso se definen las probabilidades de desplazamiento de una partícula,

$$p = \text{Prob}(X(n+1) = x+1 | X(n) = x)$$

$$q = \text{Prob}(X(n+1) = x-1 | X(n) = x)$$

donde las variables q y p son las probabilidades de que una partícula se encuentre en una posición $x+1$ o bien $x-1$ en el paso n , gracias a esto se puede notar que la probabilidad tiene una distribución binomial, con lo que se define el elemento ν que describe las combinaciones posibles que existen para expresar el estado de la partícula, en concreto,

$$v_{x,n} = \binom{n}{\frac{1}{2}(n+x)} p^{1/2(n+x)} q^{1/2(n-x)}. \quad (\text{B.1})$$

Ahora bien, es prudente calcular el valor esperado y la varianza de este camino al azar, para esto se utiliza la definición,

$$E(X) = \sum_{i=1}^n x_i P[X = x_i], \quad (\text{B.2})$$

se puede llegar a dicha definición mediante un cambio de variable,

$$\sum_{x=-n}^n x \binom{n}{\frac{1}{2}(n+x)} p^{1/2(n+x)} q^{1/2(n-x)}, \quad (\text{B.3})$$

haciendo $x = 2k - n$ se obtiene que

$$\sum_{k=0}^n (2k - n) \binom{n}{k} p^k q^{n-k} = E(X_n). \quad (\text{B.4})$$

Para proceder se desarrolla el binomial dentro de las sumas, para el primer termino de la derecha se recurre a la definición del coeficiente binomial,

$$\binom{n}{k} = \frac{n}{k} \binom{n-1}{k-1}, \quad (\text{B.5})$$

además de la siguiente afirmación,

$$\sum_{k=0}^n k \binom{n}{k} p^k q^{n-k} = \sum_{k=1}^n k \binom{n}{k} p^k q^{n-k}, \quad (\text{B.6})$$

de igual manera se hace uso de la definición del binomio de Newton para el segundo termino a la derecha,

$$(a + b)^n = \sum_{x=0}^n \binom{n}{x} a^x b^{n-x}. \quad (\text{B.7})$$

El usar las afirmaciones anteriores ayuda a escribir la ecuación (B.4) de la manera siguiente,

$$\begin{aligned} E(X_n) &= 2 \sum_{k=1}^n k \frac{n}{k} \binom{n-1}{k-1} p^k q^{n-k} - n(p+q)^n \\ &= 2n \sum_{k=1}^n \binom{n-1}{k-1} p^k q^{n-k} - n, \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

debe recordarse que al tratarse de una probabilidad con distribución binomial se tiene estrictamente que $p + q = 1$, de ahí porque en la segunda igualdad de la ecuación (B.8). Para continuar, se pide que $m = k - 1$, lo que permite escribir lo siguiente,

$$\begin{aligned} &\sum_{k=1}^n \binom{n-1}{k-1} p^k q^{n-k} \\ &= \sum_{m=0}^{n-1} \binom{n-1}{m} p^{m+1} q^{n-(m+1)} \\ &= p \sum_{m=0}^{n-1} \binom{n-1}{m} p^m q^{(n-1)-m} \\ &= p(p+q)^{n-1} = p, \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

de esta manera se concluye entonces que, el valor esperado es,

$$E(X_n) = n(2p - 1) = n(p - q). \quad (\text{B.10})$$

Continuando con la varianza, la definición es,

$$Var(X) = \sum_{x=0}^n (x - E(x))^2 P(X = x_i), \quad (\text{B.11})$$

nuevamente, se puede llegar a la definición mediante el mismo cambio de variable aplicado en la ecuación (B.1),

$$\begin{aligned} &\sum_{x=-n}^n (x - E(X_n))^2 \binom{n}{\frac{1}{2}(n+x)} p^{\frac{n+x}{2}} q^{\frac{n-x}{2}} \\ &= \sum_{k=0}^n (2k - n - E(X_n))^2 \binom{n}{k} p^k q^{n-k} \end{aligned}$$

así

$$Var(X_n) = \sum_{k=0}^n (2k - n - E(X_n))^2 \binom{n}{k} p^k q^{n-k}. \quad (\text{B.12})$$

Primero, se usa el valor encontrado para $E(X_n)$, esto se puede hacer dado que es independiente de k ,

$$Var(X_n) = \sum_{k=0}^n (2k + 2np)^2 \binom{n}{k} p^k q^{n-k}, \quad (\text{B.13})$$

se desarrolla la potencia que se encuentra dentro de la suma,

$$\begin{aligned} Var(X_n) &= 4 \sum_{k=0}^n k^2 \binom{n}{k} p^k q^{n-k} \\ &\quad - 8pn \sum_{k=0}^n k \binom{n}{k} p^k q^{n-k} \\ &\quad + 4p^2 n^2 \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} p^k q^{n-k}. \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

Para continuar se hace uso de los resultados notables utilizados para el desarrollo del valor esperado, es decir,

$$\sum_{k=0}^n k \binom{n}{k} p^k q^{n-k} = np$$

esto para el segundo termino a la derecha de la igualdad en la ecuación (B.14),

$$(a + b)^n = \sum_{x=0}^n \binom{n}{x} a^x b^{n-x}$$

para el tercer termino al lado derecho de la igualdad, ahora bien, para el primer termino se aplica la misma idea que se utilizo en el la ecuación (B.8) es decir,

$$\sum_{k=0}^n k^2 \binom{n}{k} p^k q^{n-k} = \sum_{k=1}^n k^2 \frac{n}{k} \binom{n-1}{k-1} p^k q^{n-k}, \quad (\text{B.15})$$

y haciendo el cambio de variable a $k - 1 = m$ a la ecuación (B.15) es posible escribir lo siguiente,

$$\begin{aligned} &\sum_{m=0}^{n-1} (m+1)n \binom{n-1}{m} p^{m+1} q^{(n-1)-m} \\ &= np \left[\sum_{m=0}^{n-1} m \binom{n-1}{m} p^m q^{(n-1)-m} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{m=0}^{n-1} \binom{n-1}{m} p^m q^{(n-1)-m} \right], \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

para el primer termino a la derecha se vuelve a aplicar la misma idea que en la ecuación (B.8), en cuanto al segundo termino puede verse claramente que es una forma de escribir el binomio de Newton,

$$\begin{aligned} &\sum_{m=0}^{n-1} m \binom{n-1}{m} p^m + q^{(n-1)-m} \\ &= \sum_{m=1}^{n-1} m \frac{n-1}{m} \binom{n-2}{m-1} p^m + q^{(n-1)-m}, \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

entonces, proponiendo que $l = m - 1$ se consigue el siguiente cambio a la ecuación (B.17),

$$\begin{aligned} &\sum_{l=0}^{n-2} (n-1) \binom{n-2}{l} p^{l+1} + q^{(n-2)-l} \\ &= p(n-1) \sum_{l=0}^{n-2} \binom{n-2}{l} p^l q^{(n-2)-l}, \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

de donde es claro que,

$$\sum_{l=0}^{n-2} \binom{n-2}{l} p^l q^{(n-2)-l} = (p+q)^{n-2} = 1. \quad (\text{B.19})$$

Con todo esto entonces se puede escribir la ecuación (B.14) cómo,

$$\begin{aligned} \text{Var}(X_n) &= 4np[(n-1)p+1] \\ &\quad - 8(pn)^2 + 4p^2n^2, \end{aligned}$$

y finalmente,

$$\text{Var}(X_n) = 4npq. \quad (\text{B.20})$$

Para continuar con el tratamiento estadístico, se define ahora que, para el tiempo t se tenga la siguiente relación,

$$t = n\Delta t \implies n = \frac{t}{\Delta t}, \quad (\text{B.21})$$

convirtiendo así la ecuaciones del valor esperado y la varianza a

$$\begin{aligned} E(X_n) &= \frac{t}{\Delta t}(p-q) \\ \text{Var}(X_n) &= 4pq \frac{t}{\Delta t}. \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

Sin embargo, las ecuaciones en (B.22) es necesario escalar por el factor adecuado que presentan en sus variables, anteriormente se consideraba un segmento de longitud unitaria donde la distribución de probabilidad estaba definida, por lo tanto se puede considerar un factor de escala Δx tal que, ahora las dependencias son,

$$E(X(t)) = (p-q)\Delta x \frac{t}{\Delta t}, \quad (\text{B.23})$$

$$\text{Var}(X(t)) = 4pq(\Delta x)^2 \frac{t}{\Delta t}. \quad (\text{B.24})$$

Es útil definir la siguiente constante,

$$\frac{(\Delta x)^2}{\Delta t} = 2D, \quad (\text{B.25})$$

D es una constante estrictamente positiva. Ahora, los factores de Δx y Δt deben ser muy pequeños que estos tiendan a cero, pero no de forma arbitraria, esto con la finalidad de que la varianza sea finita y no nula.

Para proceder se recurre a la manipulación de los elementos Δx y Δt , por lo que es razonable que p y q varíen respecto a Δx , pero de manera que el producto de p y q no sea nulo, es necesario dado que, de lo contrario, la consecuencia es que la partícula se mueva solo en una dirección de forma indefinida, dicha manipulación es necesario para ligar la varianza al cambio de Δx mientras este se aproxima a cero. Se busca que, de igual manera el valor esperado no diverja mientras sucede la misma aproximación, para esto, en el caso de la máxima probabilidad, es decir $p = q = 1/2$, es necesario asumir que,

$$p - q = \frac{c\Delta x}{D},$$

y al usar la condición de q se puede escribir entonces,

$$\begin{aligned} p - (1-p) &= \frac{c\Delta x}{D} \implies \\ p &= \frac{1}{2} + \frac{c\Delta x}{2D}, \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

y de igual manera que,

$$q = \frac{1}{2} - \frac{c\Delta x}{2D}, \quad (\text{B.27})$$

la selección de los parámetros se vuelve una necesidad, D recibe el nombre de constante de difusión, mientras que c es el coeficiente de arrastre, esto será claro en unos momentos más.

Al considerar que Δx y Δt se aproximan a cero es posible definir la nueva función de probabilidad,

$$\begin{aligned} v_{n,k} &= \text{Prob}(X(n\Delta t) = k\Delta x) \\ &= f(n\Delta t, k\Delta x) \end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

que es la probabilidad de los desplazamientos de la partícula al haber cada vez más puntos, es decir cuando se pasa a un continuo de puntos.

Entonces se recuerda que, el recorrido al azar de una partícula se puede definir por una función de distribución de probabilidad binomial, dicha función cumple con lo siguiente,

$$v_{k,n+1} = qv_{k+1,n} + pv_{k-1,n}, \quad (\text{B.29})$$

los parámetros k y n al multiplicarse por Δx y Δt donde estos últimos pueden establecerse tan pequeños como se desee, entonces, se establece un continuo en la ecuación y de acuerdo a la ecuación (B.28) se puede escribir entonces,

$$v_{k\Delta x, (n+1)\Delta} = qv_{(k+1)\Delta, n\Delta} + pv_{(k-1)\Delta, n\Delta},$$

y al utilizar, $k\Delta x = x$ y $n\Delta t = t$, el cambio en la ecuación es,

$$v_{x, t+\Delta t} = qv_{x+\Delta x, t} + pv_{x-\Delta x, t},$$

y cambiando notación se tiene finalmente,

$$\begin{aligned} v_{x, t+\Delta t} &= qv_{x+\Delta x, t} + pv_{x-\Delta x, t} \implies \\ f(x, t + \Delta t) &= qf(x + \Delta x, t) + pf(x - \Delta x, t). \end{aligned} \quad (\text{B.30})$$

C. Solución a la ecuación (2.27)

Con lo desarrollado en la sección 2.3, se llego a la ecuación (2.32),

$$p(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{p}_0 e^{(i\omega\nu - D\omega^2)t} e^{-i\omega x} d\omega \quad (\text{C.1})$$

que es el resultado de aplicar la transformada inversa de fourier a la ecuación (2.31). Ahora bien, para obtener la solución que se escribe en (2.33),

$$p(x, t) = \frac{p_0}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-(x-\nu t)^2/4Dt} \quad (\text{C.2})$$

la integral escrita en la ecuación (C.1) se soluciona en el campo complejo, el por que de esto se muestra enseguida.

Como primer paso para la solucionar la integral, se reescribe la exponencial en la ecuación (C.1),

$$e^{(i\omega\nu - D\omega^2)t} e^{-i\omega x} = e^{-(i\omega(x-\nu t) + D\omega^2 t)} \quad (\text{C.3})$$

se completa el cuadrado del argumento de la exponencial del lado derecho de la ecuación (C.3)

$$\begin{aligned} & - (i\omega(x - \nu t) + D\omega^2 t) \\ &= -Dt \left(\omega^2 + \frac{i\omega}{Dt} (x - \nu t) \right) \\ &= -Dt \left\{ \omega^2 + \frac{i\omega}{Dt} (x - \nu t) \right. \\ & \quad \left. + \left[\frac{i(x - \nu t)}{2Dt} \right]^2 - \left[\frac{i(x - \nu t)}{2Dt} \right]^2 \right\} \end{aligned}$$

entonces,

$$- [i\omega(x - \nu t) - D\omega^2 t] = -Dt \left[\omega + \frac{i(x - \nu t)}{2Dt} \right]^2 + Dt \left[\frac{i(x - \nu t)}{2Dt} \right]^2 \quad (C.4)$$

Se usa el resultado de la ecuación (C.4) en la ecuación (C.1), se encuentra,

$$p(x, t) = \frac{p_0}{2\pi} e^{Dt \left[\frac{i(x - \nu t)}{2Dt} \right]^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dt \left[\omega + \frac{i(x - \nu t)}{2Dt} \right]^2} d\omega$$

o en su defecto,

$$p(x, t) = \frac{p_0}{2\pi} e^{-\frac{(x - \nu t)^2}{4Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dt \left[\omega + \frac{i(x - \nu t)}{2Dt} \right]^2} d\omega. \quad (C.5)$$

Ahora, definiendo el cambio de variable

$$z = \omega + \frac{i(x - \nu t)}{2Dt} \quad (C.6)$$

con esto, la ecuación (C.5) se escribe de la forma siguiente,

$$p(x, t) = \frac{p_0}{2\pi} e^{-\frac{(x - \nu t)^2}{4Dt}} \int_{-\infty + \frac{i(x - \nu t)}{2Dt}}^{\infty + \frac{i(x - \nu t)}{2Dt}} e^{-Dtz^2} dz. \quad (C.7)$$

Para resolver esta integral se tiene que usar un útil teorema del calculo de variable compleja: el teorema de Cauchy. Éste establece que la integral de línea de alguna función de variable compleja $f(z)$ sobre una trayectoria cerrada C se anula si $f(z)$ es una función analítica de $z = x + iy$ (es decir satisface las relaciones de Cauchy Riemann),

$$\oint_C f(z) = 0.$$

Es necesario encontrar una trayectoria de integración apropiada para evaluar la integral. Al considerar los límites de la integral en la ecuación (C.6),

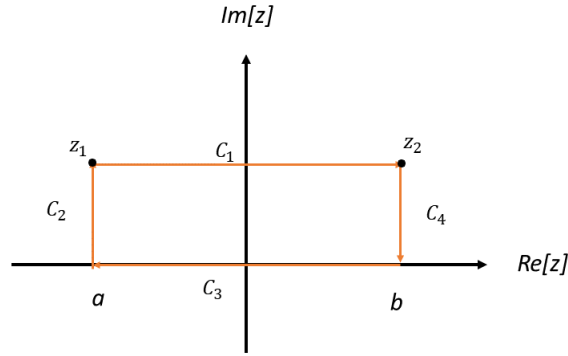


Figura 22: Trayectoria de integración del campo complejo.

$$\begin{aligned} z_1 &= a + i \frac{(x - \nu t)}{2Dt} \\ z_2 &= b + i \frac{(x - \nu t)}{2Dt} \end{aligned} \quad (C.8)$$

donde, a y b pueden hacerse tender a $-\infty$ y ∞ , respectivamente, representándolos en un plano complejo como el de la figura (número de figura aquí). El contorno cerrado más simple que conecta z_1 con z_2 esta formado por las líneas $\{C_1, C_2, C_3, C_4\}$, al aplicar el teorema de Cauchy se tendría que,

$$\begin{aligned} \oint_C f(z) dz &= \int_{C_1} f(z) dz + \int_{C_2} f(z) dz \\ &+ \int_{C_3} f(z) dz + \int_{C_4} f(z) dz = 0, \end{aligned} \quad (C.9)$$

donde se utilizará a,

$$f(z) = e^{-Dtz^2}.$$

Ahora bien, ese que, al hacer las parametrizaciones de los tramos C_2 y C_4 son,

$$y_2(x) = b + i\alpha x, \quad x \in [1, 0]$$

$$y_4(x) = a + i\alpha x, \quad x \in [0, 1]$$

aquí $\alpha = \frac{(x-\nu t)}{2Dt}$,

$$\int_{C_2} e^{-Dtz^2} dz = \int_1^0 e^{-Dty^2(x)} \|y'(x)\| dx$$

$$\int_{C_4} e^{-Dtz^2} dz = \int_0^1 e^{-Dty^2(x)} \|y'(x)\| dx$$

por ende se puede ver que

$$\int_{C_2} e^{-Dtz^2} dz = - \int_{C_4} e^{-Dtz^2} dz, \quad (\text{C.10})$$

así, se llega a que,

$$\int_{C_1} f(z) dz + \int_{C_3} f(z) dz = 0 \quad (\text{C.11})$$

a la par dichas integrales son,

$$\int_{C_1} f(z) dz = \int_{z_1}^{z_2} e^{-Dtz^2} dz$$

$$\int_{C_3} f(z) dz = \int_b^a e^{-Dtz^2} dz$$

además que, $a \rightarrow -\infty$ y $b \rightarrow \infty$, por lo tanto

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dtz^2} dz = \int_{z_1}^{z_2} e^{-Dtz^2} dz \quad (\text{C.12})$$

con esto la ecuación (C.1) se escribe como,

$$p(x, t) = \frac{p_0}{2\pi} e^{-\frac{(x-\nu t)^2}{4Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dtz^2} dz \quad (\text{C.13})$$

para solucionar la integral se denota por I a la integral de la ecuación (C.13),

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{Dtz^2} dz. \quad (\text{C.14})$$

Para evaluar a (C.14) se eleva al cuadrado la integral I ,

$$\begin{aligned} I^2 &= \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{Dtz^2} dz \right) \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{Dty^2} dy \right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dt(z^2+y^2)} dz dy \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

se hace el cambio a coordenadas polares

$$I^2 = \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} e^{-Dtr^2} r dr d\theta. \quad (\text{C.16})$$

Con el cambio de variable $u = -Dtr^2$ en (C.16) se llega a,

$$I^2 = -\frac{2\pi}{2Dt} \int_0^{-\infty} e^u du = -\frac{\pi}{Dt} \Big|_0^{-\infty} = \frac{\pi}{Dt}, \quad (\text{C.17})$$

al obtener la raíz cuadrada de I se llega a,

$$I = \sqrt{\frac{\pi}{Dt}}. \quad (\text{C.18})$$

Con lo que finalmente se encuentra la solución a la ecuación de difusión con arrastre (C.1),

$$p(x, t) = \frac{p_0}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{(x-\nu t)^2}{4Dt}}. \quad (\text{C.19})$$

D. Descripción de la función $f(\xi)$

$f(\xi)$ es la función de distribución gaussiana, específicamente tiene la siguiente forma

$$f(\xi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\xi^2/(4Dt)}. \quad (D.1)$$

que es la solución a la ecuación de difusión sin arrastre.

Entonces, al desarrollar los términos de ξ en la función $p(x - \xi(dt)^{1/2})$ y al integrar se encuentra que

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi f(\xi) p(x - \xi(dt)^{1/2}) &= \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi f(\xi) \frac{\xi^n (dt)^{n/2}}{n!} \frac{\partial^n p(x, t)}{\partial x^n} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(dt)^{n/2}}{n!} \frac{\partial^n p(x, t)}{\partial x^n} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi f(\xi) \xi^n \end{aligned} \quad (D.2)$$

y esto es la definición de promedio para una variable aleatoria/ variable estocástica X

$$\langle X^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(X) X^n dX$$

con la propiedad de que si $n = 0$

$$\langle X^0 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(X) dX = 1$$

que es la propiedad de cualquier distribución de probabilidad.

De esta forma se llega a los resultados presentados en la sección (3.2)

E. Determinación de las constantes a_0 , a_n y b_n

A través de la solución analítica de la ecuación de difusión se encuentran únicamente los coeficientes a_n o bien b_n como se demostró con anterioridad, sin embargo, la forma específica que tienen los coeficientes de Fourier se demuestran mediante el siguiente procedimiento:

Para a_0 , se utilizar la definición de serie de fourier de una función,

$$f(x) = a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left[a_n \cos \frac{n\pi x}{L} + b_n \sen \frac{n\pi x}{L} \right] \quad (E.1)$$

ahora, se integra la ecuación en el periodo de la función, en este caso de $(-L, L)$, así

$$\begin{aligned} \int_{-L}^L f(x) dx &= \int_{-L}^L a_0 dx + \sum_{n=1}^{\infty} \left[\int_{-L}^L a_n \cos \frac{n\pi x}{L} dx + \int_{-L}^L b_n \sen \frac{n\pi x}{L} dx \right] \\ \int_{-L}^L f(x) dx &= a_0 * 2L + \sum_{n=1}^{\infty} L \left[a_n \sen \frac{(n\pi x/L)}{n\pi} - b_n \cos \frac{(n\pi x/L)}{n\pi} \right] \Big|_{-L}^L. \end{aligned} \quad (E.2)$$

Las integrales del seno y coseno son cero dado que se integra en un periodo completo, por ende se tiene que, a_0 es igual a

$$a_0 = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L f(x) dx. \quad (E.3)$$

Para a_n se multiplica la definición de serie de fourier por la función $\cos(m\pi x/L)$ y se integra a continuación

$$\int_{-L}^L f(x) \cos \frac{m\pi x}{L} dx = \int_{-L}^L a_0 \cos \frac{m\pi x}{L} dx + \sum_{n=1}^{\infty} \left[\int_{-L}^L a_n \cos \frac{n\pi x}{L} \cos \frac{m\pi x}{L} dx + \int_{-L}^L b_n \cos \frac{m\pi x}{L} \sen \frac{n\pi x}{L} dx \right] \quad (E.4)$$

utilizando la propiedades de ortogonalidad de las funciones trigonométricas es decir,

$$\int_{-L}^L \text{sen}(m\pi x/L) \text{sen}(n\pi x/L) dx = \begin{cases} 0 & m \neq n \\ L & m = n \end{cases} \quad (\text{E.5})$$

$$\int_{-L}^L \text{cos}(m\pi x/L) \text{cos}(n\pi x/L) dx = \begin{cases} 0 & m \neq n \\ L & m = n \end{cases} \quad (\text{E.6})$$

$$\int_{-L}^L \text{sen}(m\pi x/L) \text{cos}(n\pi x/L) dx = 0 \quad \forall m, n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{E.7})$$

al usar estas propiedades se obtiene que el valor de la primer y tercera integral a la derecha de la igualdad, ambas son cero, en el caso de la segunda, si $m = n$ se obtiene que la suma se reduce a un solo término (por ortogonalidad), es decir n , por lo tanto

$$\int_{-L}^L f(x) \text{cos} \frac{m\pi x}{L} dx = a_n L$$

$$a_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \text{cos} \frac{m\pi x}{L} dx. \quad (\text{E.8})$$

Para b_n se sigue un procedimiento análogo al caso de a_n , solo que ahora la función es $\text{sen}(m\pi x/L)$

$$\int_{-L}^L f(x) \text{sen} \frac{m\pi x}{L} dx = \int_{-L}^L a_0 \text{sen} \frac{m\pi x}{L} dx + \sum_{n=1}^{\infty} \left[\int_{-L}^L a_n \text{cos} \frac{n\pi x}{L} \text{sen} \frac{m\pi x}{L} dx + \int_{-L}^L b_n \text{sen} \frac{m\pi x}{L} \text{sen} \frac{n\pi x}{L} dx \right] \quad (\text{E.9})$$

al usar los resultados anteriores, es decir la integral sobre un periodo completo y ortogonalidad de funciones, se puede cancelar directamente la primer y segunda integral a la derecha de la igualdad y, al establecer que $m = n$ la tercer integral se reduce al a un solo término, esto es

$$\int_{-L}^L f(x) \text{sen} \frac{m\pi x}{L} dx = b_n L$$

$$b_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \text{sen} \frac{m\pi x}{L} dx. \quad (\text{E.10})$$

Con esto es posible determinar los coeficientes de la serie de Fourier de una función. Notese que $f(x)$ corresponde a la función de condición inicial del problema.

F. Demostración de la ecuación 4.17

Primero se parte de la ecuación (4.4), al aplicar las condiciones de frontera se tiene lo siguiente

$$\tilde{Q}_r(a, s) = 0 = A \cosh(\alpha a) + B \sinh(\alpha a) + C \quad (\text{F.1})$$

$$\tilde{Q}_r(b, s) = 0 = A \cosh(\alpha b) + B \sinh(\alpha b) + C \quad (\text{F.2})$$

donde $C = [1 + r\tilde{Q}_r(x_0, s)]/(r + s)$. Con esto se obtiene un sistema de ecuaciones para A y B , entonces, al sustituir (F.1) en (F.2) se encuentra el valor de B ,

$$B = C \frac{\cosh(\alpha b) - \cosh(\alpha a)}{\sinh(\alpha(b - a))} \quad (\text{F.3})$$

con lo cual es posible encontrar el valor de A ,

$$A = \frac{C}{\cosh(\alpha a)} - C \frac{\cosh(\alpha b) - \cosh(\alpha a)}{\sinh(\alpha(b - a))} \frac{\sinh(\alpha a)}{\cosh(\alpha a)} \quad (\text{F.4})$$

que es posible simplificar gracias a las identidades trigonométricas en

$$A = C \frac{\sinh(\alpha a) - \sinh(\alpha b)}{\sinh \alpha(b - a)} \quad (\text{F.5})$$

de esa manera se tiene una expresión totalmente explícita para $\tilde{Q}_r(x, s)$,

$$\tilde{Q}_r(x, s) = C \frac{\sinh(\alpha a) - \sinh(\alpha b)}{\sinh \alpha(b-a)} \cosh(\alpha x) + C \frac{\cosh(\alpha b) - \cosh(\alpha a)}{\sinh \alpha(b-a)} \sinh(\alpha x) + C \quad (\text{F.6})$$

sin embargo es posible reducir aún más esta expresión al utilizar la identidad trigonométrica siguiente

$$\sinh(\alpha a) \cosh(\alpha x) = \frac{\sinh(\alpha(a-x)) + \sinh(\alpha(a+x))}{2} \quad (\text{F.7})$$

que deriva en lo siguiente para la ecuación (F.6)

$$\begin{aligned} \tilde{Q}_r(x, s) = & C \frac{\sinh(\alpha(a-x)) + \sinh \alpha(a-x) - \sinh(\alpha(b-a)) - \sinh(\alpha(b+x))}{2 \sinh(\alpha(b-a))} \\ & + C \frac{\sinh(\alpha(x-b)) + \sinh \alpha(x+b) - \sinh(\alpha(x-a)) - \sinh(\alpha(a+x))}{2 \sinh(\alpha(b-a))} + C \end{aligned} \quad (\text{F.8})$$

y que finalmente se simplifica en

$$\tilde{Q}_r(x, s) = \frac{1 + r\tilde{Q}_r(x_0, s)}{s + r} \left[-\frac{\sinh(\alpha(b-x)) + \sinh(\alpha(x-a))}{\sinh(\alpha(b-a))} + 1 \right] \quad (\text{F.9})$$

entonces si $x_0 = x$ se puede encontrar una forma explícita de $\tilde{Q}_r(x_0, s)$,

$$\tilde{Q}_r(x_0, s) = \frac{1 + r\tilde{Q}_r(x_0, s)}{s + r} \left[-\frac{\sinh \alpha(b-x) + \sinh \alpha(x-a)}{\sinh \alpha(b-a)} + 1 \right]$$

ya si se define que $g_r(x_0, s) = (\sinh(\alpha(b-x)) + \sinh(\alpha(x-a)))/\sinh(\alpha(b-a))$, es posible hacer la siguiente álgebra

$$\begin{aligned} (s+r)\tilde{Q}_r(x_0, s) &= \frac{1 + r\tilde{Q}_r(x_0, s)}{r+s} (g_r(x_0, s) + 1) \\ \tilde{Q}_r(x_0, s)(s+r+r g_r(x_0, s) - r) &= 1 - g_r(x_0, s) \\ \tilde{Q}_r(x_0, s) &= \frac{1 - g_r(x_0, s)}{s + r g_r(x_0, s)}. \end{aligned} \quad (\text{F.10})$$

QED.

G. Demostración de la ecuación (4.12)

Como bien se menciona en la sección 4.2 el problema consiste en resolver la ecuación de difusión sin reinicio con las condiciones de frontera antes descritas; sin embargo, este problema no cumple directamente con la estructura necesaria para calcular el coeficiente de fourier de manera directa ya que el dominio de integración de la función no empieza en 0 si no a , pero es posible calcular el coeficiente de fourier tras un reescalamiento al problema. Para ello es necesario definir la siguiente variable

$$y = x - a \quad (\text{G.1})$$

esto no altera para nada la manera en que se resuelve la ecuación de difusión, dado que el cambio de variable es lineal, por lo tanto,

$$\frac{\partial Q_0(y, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 Q_0(y, t)}{\partial y_0^2} \quad (\text{G.2})$$

lo único que hace el reescalamiento es cambiar la forma en que interpreta el dominio donde ocurre el problema. ya que así $y \in [0, L]$ con $L = b - a$, entonces,

$$Q_0(y, t) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin\left(\frac{n\pi y}{b-a}\right) e^{-\left(\frac{n\pi}{b-a}\right)^2 D t}. \quad (\text{G.3})$$

La condición inicial es $Q_0(y_0, 0) = 1$, entonces, como se ha explicado anteriormente, el coeficiente b_n se calcula de multiplicar la ecuación de la probabilidad de supervivencia por una función sen $y_0 m \pi / (b - a)$ y luego integrar en el intervalo $[0, b - a]$,

$$\int_0^\infty 1 \operatorname{sen} \frac{y_0 n \pi}{b - a} dy_0 = \sum_{n=1}^\infty \int_0^\infty b_n \operatorname{sen} \frac{y_0 m \pi}{b - a} \operatorname{sen} \frac{y_0 n \pi}{b - a}, \quad (\text{G.4})$$

y gracias a que la integral es no nula en $n = m$ la suma colapsa en un solo término. Seguido de esto usan las identidades del apéndice E, dando como resultado

$$b_n = \frac{2}{b - a} \int_0^{b-a} \operatorname{sen} \left(\frac{n \pi y}{b - a} \right) dy \quad (\text{G.5})$$

que tiene por solución

$$b_n = \frac{2}{n \pi} [1 - \cos(n \pi)] \quad (\text{G.6})$$

que es el valor de la función $\Phi(n)$ antes mencionado. Ahora bien, dado que se trata de la *backwards master equation* la variable final es y_0 y por ende a x_0 , entonces,

$$Q_0(y_0, t) = 2 \sum_{n=1}^\infty \Phi(n) \operatorname{sen} \left(\frac{n \pi}{b - a} y_0 \right) e^{-\left(\frac{n \pi}{b - a}\right)^2 D t} \quad (\text{G.7})$$

que en términos de la variable x_0 es la ecuación (4.12)

$$Q_0(x_0, t) = 2 \sum_{n=1}^\infty \Phi(n) \operatorname{sen} \left(\frac{n \pi (x_0 - a)}{b - a} \right) e^{-\left(\frac{n \pi}{b - a}\right)^2 D t} = 2 \sum_{n=1}^\infty \Phi(n) \psi_n(x_0) e^{-\left(\frac{n \pi}{b - a}\right)^2 D t} \quad (\text{G.8})$$

QED.

H. Demostración del tiempo promedio de salida condicional

El tiempo condicional se define como

$$\langle T_r(x_0) \rangle_\pm = \frac{-\left. \frac{\partial \tilde{J}_\pm(x_0, s)}{\partial s} \right|_{s \rightarrow 0}}{\tilde{J}_\pm(x_0, 0)} \quad (\text{H.1})$$

ya se conoce la forma explícita del flujo, sin embargo para no dejar espacios vacíos se procede con su demostración,

$$\tilde{J}_+(x_0, s) = -D \left. \frac{\partial \tilde{P}_r(x, s)}{\partial x} \right|_{x \rightarrow b} \quad (\text{H.2})$$

dado que la derivada es respecto a x y no x_0 la derivada de la función $\tilde{P}_r(x, s)$ se reduce a

$$\frac{\partial \tilde{P}_r(x, s)}{\partial x} = \frac{\alpha}{2} \frac{-\alpha \frac{\partial |x - x_0|}{\partial x} \operatorname{senh} \alpha(b - a - |x - x_0|) + \alpha \operatorname{senh} \alpha(b + a - x - x_0)}{s \operatorname{senh} \alpha(b - a) + r(\operatorname{senh} \alpha(x_0 - a) + \operatorname{senh} \alpha(b - x_0))} \quad (\text{H.3})$$

se recuerda la derivada del valor absoluto de una función

$$y(x) = |u(x)| \implies |y(x)|' = \frac{u}{|u|} u'$$

lo que permite simplificar el problema dependiendo del flujo que desea encontrarse, y dado que $x_0 < b$ y $a < x_0$ se sabe completamente el signo que acompaña al valor absoluto,

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \tilde{P}_r(x, s)}{\partial x} \right|_{x \rightarrow b} &= \frac{\alpha}{2} \frac{-\alpha \frac{b - x_0}{|b - x_0|} \operatorname{senh} \alpha(b - a - |b - x_0|) + \alpha \operatorname{senh} \alpha(b + a - b - x_0)}{s \operatorname{senh} \alpha(b - a) + r(\operatorname{senh} \alpha(x_0 - a) + \operatorname{senh} \alpha(b - x_0))} \\ &= \frac{\alpha}{2} \frac{-\alpha \operatorname{senh} \alpha(x_0 - a) + \alpha \operatorname{senh} \alpha(+a - x_0)}{s \operatorname{senh} \alpha(b - a) + r(\operatorname{senh} \alpha(x_0 - a) + \operatorname{senh} \alpha(b - x_0))} \end{aligned}$$

y finalmente

$$\left. \frac{\partial \tilde{P}_r(x, s)}{\partial x} \right|_{x \rightarrow b} = - \frac{\alpha^2 \sinh \alpha(x_0 - a)}{s \sinh \alpha(b - a) + r(\sinh \alpha(x_0 - a) + \sinh \alpha(b - x_0))}. \quad (\text{H.4})$$

El procedimiento es exactamente el mismo para el flujo a través de la frontera a ,

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \tilde{P}_r(x, s)}{\partial x} \right|_{x \rightarrow a} &= \frac{\alpha}{2} \frac{-\alpha \frac{a - x_0}{|a - x_0|} \sinh \alpha(b - a - |a - x_0|) + \alpha \sinh \alpha(b + a - a - x_0)}{s \sinh \alpha(b - a) + r(\sinh \alpha(x_0 - a) + \sinh \alpha(b - x_0))} \\ &= \frac{\alpha}{2} \frac{\alpha \sinh \alpha(b - x_0) + \alpha \sinh \alpha(b - x_0)}{s \sinh \alpha(b - a) + r(\sinh \alpha(x_0 - a) + \sinh \alpha(b - x_0))} \end{aligned}$$

que concluye en

$$\left. \frac{\partial \tilde{P}_r(x, s)}{\partial x} \right|_{x \rightarrow a} = \frac{\alpha^2 \sinh \alpha(b - x_0)}{s \sinh \alpha(b - a) + r(\sinh \alpha(x_0 - a) + \sinh \alpha(b - x_0))}. \quad (\text{H.5})$$

esto demuestra lo establecido en las ecuaciones (4.53) y (4.54) al multiplicar por la contante de difusión y el signo correspondiente a cada proceso.

Ahora bien, es necesario calcularlas derivadas respecto a s para encontrar en denominador de la función $\langle T_r(x_0) \rangle_{\pm}$, ambas funciones de flujo son idénticas con excepción del numerador, el resultado se muestra a continuación

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \tilde{J}_+(x, s)}{\partial s} \right|_{s \rightarrow 0} &= \frac{\left(\sinh(\alpha(x_0 - a)) + \frac{\alpha(x_0 - a)}{2} \cosh \alpha(x_0 - a) \right) [s \sinh \alpha_0(b - a) + r(\sinh \alpha(b - x_0) + \sinh \alpha(x_0 - a))]}{[s \sinh \alpha_0(b - a) + r(\sinh \alpha(b - x_0) + \sinh \alpha(x_0 - a))]^2} \\ &\quad - \frac{(s + r) \sinh \alpha(x_0 - a) \left[\sinh \alpha(b - a) + \frac{s(b - a)}{2\sqrt{D}(s + r)} \cosh \alpha(b - a) \right]}{[s \sinh \alpha_0(b - a) + r(\sinh \alpha(b - x_0) + \sinh \alpha(x_0 - a))]^2} \\ &\quad + \frac{r \left(\frac{(x_0 - a)}{2\sqrt{D}(s + r)} \cosh \alpha(x_0 - a) + \frac{(b - x_0)}{2\sqrt{D}(s + r)} \cosh \alpha(b - x_0) \right)}{[s \sinh \alpha_0(b - a) + r(\sinh \alpha(b - x_0) + \sinh \alpha(x_0 - a))]^2} \end{aligned}$$

es una expresión bastante complicada de simplificar, sin embargo, en el limite de $s \rightarrow 0$ no hay indeterminaciones, por lo que se puede sustituir directamente el limite, de esta manera ahora se tiene que

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \tilde{J}_+(x, s)}{\partial s} \right|_{s \rightarrow 0} &= \frac{\left(\sinh(\alpha_0(x_0 - a)) + \frac{\alpha_0(x_0 - a)}{2} \cosh \alpha_0(x_0 - a) \right) [r(\sinh \alpha_0(b - x_0) + \sinh \alpha_0(x_0 - a))]}{[r(\sinh \alpha(b - x_0) + \sinh \alpha(x_0 - a))]^2} \\ &\quad - \frac{r \sinh \alpha_0(x_0 - a) \left[\sinh \alpha_0(b - a) + r \left(\frac{(x_0 - a)}{2\sqrt{Dr}} \cosh \alpha_0(x_0 - a) + \frac{(b - x_0)}{2\sqrt{r}} \cosh \alpha(b - x_0) \right) \right]}{[r(\sinh \alpha(b - x_0) + \sinh \alpha(x_0 - a))]^2} \end{aligned}$$

y la forma simplificada es

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \tilde{J}_+(x_0, s)}{\partial s} \right|_{s \rightarrow 0} &= \frac{r \sinh^2 \alpha_0(x_0 - a) + r \sinh \alpha_0(x_0 - a) \sinh \alpha_0(b - x_0) - r \sinh \alpha_0(b - a) \sinh \alpha_0(b - x_0)}{r^2 [\sinh \alpha_0(x_0 - a) + \sinh \alpha_0(b - x_0)]^2} \\ &\quad + \frac{-\frac{r \alpha_0(b - x_0)}{2} \cosh \alpha_0(b - x_0) \sinh \alpha_0(x_0 - a) + \frac{r \alpha_0(x_0 - a)}{2} \cosh \alpha_0(x_0 - a) \sinh \alpha_0(b - x_0)}{r^2 [\sinh \alpha_0(x_0 - a) + \sinh \alpha_0(b - x_0)]^2}. \end{aligned} \quad (\text{H.6})$$

Al hacer el cociente entre la derivada del flujo y el flujo seguido de aplicar el límite $s \rightarrow 0$ el resultado no se simplifica de manera significativa, pero al hacerlo se encuentra la función \mathscr{W} antes mencionada, para ello notese que

$$\frac{r \sinh^2 \alpha_0(x_0 - a)}{2} \{2 + \operatorname{csch} \alpha_0(x_0 - a) [2 \sinh \alpha_0(b - x_0) - 2 \sinh \alpha_0(b - a) - (b - x_0) \alpha_0 \cosh \alpha_0(b - x_0) + \alpha_0(x_0 - a) \operatorname{coth} \alpha_0(x_0 - a) \sinh \alpha_0(b - x_0)]\}$$

que es el negativo de la función \mathscr{W} , específicamente en su forma $\mathscr{W}(x_0 - a, b - x_0, b - a)$, entonces, gracias a esto se puede proseguir con el tiempo promedio de salida condicional

$$\langle T_r(x_0) \rangle_+ = - \frac{\frac{r \sinh^2 \alpha_0(x_0 - a)}{2} - \mathscr{W}(x_0 - a, b - x_0, b - a)}{\frac{r^2 [\sinh \alpha_0(x_0 - a) + \sinh \alpha_0(b - x_0)]^2}{D \alpha_0^2 \sinh \alpha_0(x_0 - a)}} \frac{1}{r [\sinh \alpha_0(x_0 - a) + \sinh \alpha_0(b - x_0) +]}$$

que culmina con la ecuación del tiempo promedio condicional como se estableció en la ecuación (4.56)

$$\langle T_r(x_0) \rangle_+ = \frac{\mathscr{W}(x_0 - a, b - x_0, b - a)}{2D \alpha_0^2 [1 + \operatorname{csch} \alpha_0(x_0 - a) \sinh \alpha_0(b - x_0)]}. \quad (\text{H.7})$$

El proceso para obtener $\langle T_r(x_0) \rangle_-$ es completamente homólogo.

I. Demostración de las ecuaciones (4.58) y (4.59)

Para demostrar el valor del tiempo promedio de salida condicional por cada frontera es necesario notar que la función también puede escribirse como

$$\langle T_r(x_0) \rangle_+ = \frac{\sinh \alpha_0(x_0 - a) \mathscr{W}(x_0 - a, b - x_0, b - a)}{2D \alpha_0 [\sinh \alpha_0(x_0 - a) + \sinh \alpha_0(b - x_0)]}, \quad (\text{I.1})$$

el producto en el numerador es directamente proporcional a

$$\begin{aligned} & -2 \sinh \alpha_0(x_0 - a) + \alpha_0(b - x_0) \cosh \alpha_0(b - x_0) + 2 \sinh \alpha_0(b - a) - 2 \sinh \alpha_0(x_0 - a) + \alpha_0(b - x_0) \cosh \alpha_0(b - x_0) \\ & + 2 \sinh \alpha_0(b - a) - 2 \sinh \alpha_0(b - x_0) - \alpha_0(x_0 - a) \operatorname{coth} \alpha_0(x_0 - a) \sinh \alpha_0(b - x_0) \end{aligned} \quad (\text{I.2})$$

ahora, en el límite de $r \rightarrow 0$ las funciones hiperbólicas pueden aproximarse mediante un desarrollo en serie de Taylor. Para las funciones en la ecuación (I.2) los desarrollos son

$$\begin{aligned} \sinh \alpha_0 v & \approx \alpha_0 v + \frac{\alpha_0^3 v^3}{3!} \\ \cosh \alpha_0 v & \approx 1 + \frac{\alpha_0^2 v^2}{2!} \\ \operatorname{coth} \alpha_0 v & = \frac{1}{\alpha_0 v} + \frac{\alpha_0 v}{3} \end{aligned}$$

donde v puede ser $b - x_0$, $x_0 - a$ o $b - a$.

Antes de seguir es necesario aclarar que la función $\sinh \alpha_0(b - a)$ se puede escribir como $\sinh \alpha_0(b - x_0 + x_0 - a)$ y consecuentemente como $\sinh \alpha_0(b - x_0) \cosh \alpha_0(x_0 - a) + \sinh \alpha_0(x_0 - a) \cosh \alpha_0(b - x_0)$, seguir de esto se aplican las aproximaciones antes mencionadas, esto hace que el denominador de la

función de tiempo promedio se vea de la forma siguiente

$$\begin{aligned}
& -2 \left[\alpha_0(x_0 - a) + \frac{\alpha_0^3(x_0 - a)^3}{3!} \right] + \alpha_0(b - x_0) \left[1 + \frac{\alpha_0^2(x_0 - a)^2}{2!} \right] \\
& + 2 \left[\alpha_0(x_0 - a) + \frac{\alpha_0^3(x_0 - a)^3}{3!} \right] \left[1 + \frac{\alpha_0^2(b - x_0)^2}{2!} \right] \\
& + 2 \left[\alpha_0(b - x_0) + \frac{\alpha_0^3(b - x_0)^3}{3!} \right] \left[1 + \frac{\alpha_0^2(x_0 - a)^2}{2!} \right] \\
& - 2 \left[\alpha_0(b - x_0) + \frac{\alpha_0^3(b - x_0)^3}{3!} \right] \\
& - \alpha_0(x_0 - a) \left[\frac{1}{\alpha_0 + \frac{\alpha_0(x_0 - a)}{3}} \right] \left[\alpha_0(b - x_0) + \frac{\alpha_0^3(b - x_0)^3}{3!} \right]
\end{aligned} \tag{I.3}$$

ignorando el único termino de orden quinto, es posible simplificar en

$$\frac{\alpha_0^3(b - x_0)^3}{3} + \frac{2\alpha_0^3(x_0 - a)^2(b - x_0)}{3} + \alpha_0(b - x_0)^2(x_0 - a). \tag{I.4}$$

Esta última expresión es posible factorizarla en

$$\frac{\alpha_0^3}{3}(b - x_0)[(b - x_0)^2 + 2(x_0 - a)^2 + 3(b - x_0)(x_0 - a)]$$

notese que es posible factorizar dentro del paréntesis cuadrado un trinomio cuadrado perfecto

$$\frac{\alpha_0^3}{3}(b - x_0)[(b - x_0 + x_0 - a)^2 + (b - x_0)(x_0 - a) + (x_0 - a)] = \frac{\alpha_0^3}{3}(b - x_0)[(b - a)(b + a) + (x_0 - a)(x_0 - a + b - x_0)]$$

y finalmente en

$$\frac{\alpha_0^3}{3}(b - x_0)(b - a)[b + x_0 - 2a]. \tag{I.5}$$

Con esto se termina la aproximación para el numerador, en cuanto al denominador basta con hacer un desarrollo en serie a primer orden,

$$2D\alpha_0^2[\alpha_0(b - x_0) + \alpha_0(b - x_0)] = 2D\alpha_0^3[b - a], \tag{I.6}$$

esto se debe a que los términos de orden cubico se eliminan en el limite $r \rightarrow 0$. De esta manera al unir resultado se encuentra que

$$\langle T_{r \rightarrow}(x_0) \rangle_+ = \frac{\alpha_0^3(b - x_0)(b - a)(b + x_0 - 2a)}{6D\alpha_0^3(b - a)} \tag{I.7}$$

que finalmente se simplifica en

$$\langle T_{r \rightarrow}(x_0) \rangle_+ = \frac{(b - x_0)(b + x_0 - 2a)}{6D} \tag{I.8}$$

que es el mismo que la ecuación (4.58). Para demostrar el caso de $\langle T_{r \rightarrow 0}(x_0) \rangle_-$ se hacen las mismas aproximaciones.

J. Demostración general de los momentos $\langle T_r^n(x_0) \rangle$ y de la función $\langle T_{r \rightarrow 0}^2(x_0) \rangle$

Por definición del promedio de una función continua se tiene lo siguiente

$$\langle F^n(x) \rangle = \frac{\int_D x^n \rho(x) dx}{\int_D \rho(x)} \tag{J.1}$$

donde ρ es una función de densidad de probabilidad que define al proceso. En el caso de la ecuación de difusión dicha densidad de probabilidad es

$$f_t(t) = -\frac{\partial Q_r(x, t)}{\partial t}, \tag{J.2}$$

entonces si se desea calcular el momento n -ésimo se debe resolver la siguiente ecuación

$$\langle T_r^n(x_0) \rangle = \frac{\int_0^\infty t^n \left[-\frac{\partial Q_r(x_0, t)}{\partial t} \right]}{\int_0^\infty -\frac{\partial Q_r(x_0, t)}{\partial t} dt}. \quad (\text{J.3})$$

Ahora bien, al integrar por partes ambas partes de la división es posible llegar a

$$\langle T_r^n(x_0) \rangle = \frac{-t^n Q_r(x_0, t)|_0^\infty + n \int_0^\infty t^{(n-1)} Q_r(x_0, t) dt}{Q_r(x_0, t)|_0^\infty}$$

que la condición inicial de cualquier probabilidad de supervivencia (es decir con reinicio o sin reinicio) es $Q_r(x_0, 0) = 1$, además que $Q_r(x_0, t \rightarrow \infty) = 0$, entonces la ecuación se simplifica en

$$\langle T_r^n(x_0) \rangle = n \int_0^\infty t^{n-1} Q_r(x_0, t) dt = \mathcal{L}\{t^{n-1} Q_r(x_0, t)\}|_{s \rightarrow 0} \quad (\text{J.4})$$

el último término representa la derivada de una transformada Laplace en el límite $s \rightarrow 0$,

$$(-1)^n \frac{d^n \mathcal{L}\{t^n F\}}{ds^n} \Big| = \mathcal{L}\{t^n F\} \Big|$$

de manera que, siguiendo esta definición se llega a

$$\langle T_r^n(x_0) \rangle = n(-1)^{n-1} \frac{\partial^{n-1} \tilde{Q}_r(x_0, s)}{\partial s^{n-1}}. \quad (\text{J.5})$$

En el caso de $n = 2$ se llega al resultado antes puesto en el trabajo.

Ahora, para encontrar el valor de segundo momento en ausencia de reinicio se debe de encontrar la probabilidad de supervivencia sin reinicio. De la ecuación (4.6) se tiene que la probabilidad de supervivencia con reinicio es

$$\tilde{Q}_r(x_0, t) = \frac{1 - g(x_0, s)}{s - r g_r(x_0, s)}$$

en el límite de $r \rightarrow 0$ la ecuación es ahora

$$\tilde{Q}_0(x_0, t) = \frac{1 - g(x_0, s)}{s} = \frac{\sinh(b-a)\alpha - \sinh(b-x_0)\alpha - \sinh(x_0-a)\alpha}{s \sinh(b-a)\alpha}. \quad (\text{J.6})$$

Lo único que resta es hacer la derivada respecto a s y después evaluar en el límite $s \rightarrow 0$; de lo primero se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{Q}_0(x_0, s)}{\partial s} &= \frac{-\frac{(b-x_0)\alpha}{2} \cosh(b-x_0)\alpha - \frac{(x_0-a)\alpha}{2} \cosh(x_0-a)\alpha - \sinh(b-a)\alpha}{s^2 \sinh(b-a)\alpha} \\ &+ \frac{\sinh(b-x_0)\alpha + \sinh(x_0-a)\alpha + \frac{(b-a)\alpha}{2} \coth(b-a)\alpha [\sinh(b-x_0)\alpha + \sinh(x_0-a)\alpha]}{s^2 \sinh(b-a)\alpha} \end{aligned} \quad (\text{J.7})$$

antes de hacer la aproximación es prudente escribir toda la ecuación en términos de α . Esto último tiene la finalidad de apreciar en que orden hay que aproximar las funciones puestas en el problema,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{Q}_0(x_0, s)}{\partial s} &= \frac{-\frac{(b-x_0)\alpha}{2} \cosh(b-x_0)\alpha - \frac{(x_0-a)\alpha}{2} \cosh(x_0-a)\alpha - \sinh(b-a)\alpha}{D^2 \alpha^4 \sinh(b-a)\alpha} \\ &+ \frac{\sinh(b-x_0)\alpha + \sinh(x_0-a)\alpha + \frac{(b-a)\alpha}{2} \coth(b-a)\alpha [\sinh(b-x_0)\alpha + \sinh(x_0-a)\alpha]}{D^2 \alpha^4 \sinh(b-a)\alpha}. \end{aligned} \quad (\text{J.8})$$

Con esto se puede inferir que el orden mínimo de las funciones es 5 (también se cuenta la aproximación del denominador), pero al multiplicarse los factores entre si generan más términos que dan una mejor aproximación del comportamiento de la probabilidad de supervivencia en ausencia de reinicio. Para empezar se desarrollan todos los términos en serie de Taylor hasta tercer orden, además de escribir a $\sinh(b-a)\alpha$ como $\sinh(b-x_0)\alpha \cosh(x_0-a)\alpha + \sinh(x_0-a)\alpha \cosh(b-x_0)\alpha$

$$\begin{aligned}
& -\frac{(b-x_0)\alpha}{2} \left[1 + \frac{(b-x_0)^2\alpha^2}{2!} + \frac{(b-x_0)^4\alpha^4}{4!} \right] - \frac{(x_0-a)\alpha}{2} \left[1 + \frac{(x_0-a)^2\alpha^2}{2!} + \frac{(x_0-a)^4\alpha^4}{4!} \right] \\
& - \left[1 + \frac{(b-x_0)^2\alpha^2}{2!} + \frac{(b-x_0)^4\alpha^4}{4!} \right] \left[(x_0-a)\alpha + \frac{(x_0-a)^3\alpha^3}{3!} + \frac{(x_0-a)^5\alpha^5}{5!} \right] \\
& - \left[1 + \frac{(x_0-a)^2\alpha^2}{2!} + \frac{(x_0-a)^4\alpha^4}{4!} \right] \left[(b-x_0)\alpha + \frac{(b-x_0)^3\alpha^3}{3!} + \frac{(b-x_0)^5\alpha^5}{5!} \right] \\
& + \left[(b-x_0)\alpha + \frac{(b-x_0)^3\alpha^3}{3!} + \frac{(b-x_0)^5\alpha^5}{5!} \right] + \left[(x_0-a)\alpha + \frac{(x_0-a)^3\alpha^3}{3!} + \frac{(x_0-a)^5\alpha^5}{5!} \right] \\
& + \frac{(b-a)\alpha}{2} \left[\frac{1}{(b-a)\alpha} + \frac{(b-a)\alpha}{3} - \frac{(b-a)^3}{45} \right] \left[(b-x_0)\alpha + \frac{(b-x_0)^3\alpha^3}{3!} + \frac{(b-x_0)^5\alpha^5}{5!} \right] \\
& + \frac{(b-a)\alpha}{2} \left[\frac{1}{(b-a)\alpha} + \frac{(b-a)\alpha}{3} - \frac{(b-a)^3}{45} \right] \left[(x_0-a)\alpha + \frac{(x_0-a)^3\alpha^3}{3!} + \frac{(x_0-a)^5\alpha^5}{5!} \right]
\end{aligned} \tag{J.9}$$

al desarrollar todos los términos se obtiene lo siguiente

$$\begin{aligned}
& -\frac{\alpha^9(x_0-a)^7(b-x_0)^2}{1800} - \frac{\alpha^9(x_0-a)^2(b-x_0)^7}{1800} - \frac{\alpha^9(x_0-a)^8(b-x_0)}{2700} - \frac{\alpha^9(x_0-a)^6(b-x_0)^3}{2700} \\
& -\frac{\alpha^9(x_0-a)^3(b-x_0)^6}{2700} - \frac{\alpha^9(x_0-a)(b-x_0)^8}{2700} - \frac{19\alpha^9(x_0-a)^5(b-x_0)^4}{43200} - \frac{19\alpha^9(x_0-a)^4(b-x_0)^5}{43200} \\
& -\frac{1}{216}\alpha^7(x_0-a)^6(b-x_0) - \frac{1}{72}\alpha^7(x_0-a)^5(b-x_0)^2 \\
& -\frac{7}{432}\alpha^7(x_0-a)^4(b-x_0)^3 - \frac{7}{432}\alpha^7(x_0-a)^3(b-x_0)^4 - \frac{1}{72}\alpha^7(x_0-a)^2(b-x_0)^5 \\
& -\frac{1}{216}\alpha^7(x_0-a)(b-x_0)^6 - \frac{1}{24}\alpha^5(x_0-a)^4(b-x_0) - \frac{1}{6}\alpha^5(x_0-a)^3(b-x_0)^2 \\
& -\frac{1}{6}\alpha^5(x_0-a)^2(b-x_0)^3 - \frac{1}{24}\alpha^5(x_0-a)(b-x_0)^4 \\
& -\frac{\alpha^9(x_0-a)^9}{10800} - \frac{\alpha^7(x_0-a)^7}{2160} - \frac{\alpha^9(b-x_0)^9}{10800} - \frac{\alpha^7(b-x_0)^7}{2160}
\end{aligned}$$

y al truncar a quinto orden las únicas expresiones restantes son

$$-\frac{\alpha^5}{24}[(x_0-a)^4(b-x_0) + 4(x_0-a)^3(b-x_0)^2 + 4(b-x_0)^3(x_0-a)^2 + (b-x_0)^4(x_0-a)] \tag{J.10}$$

es posible factorizar un término $(x_0-a)(b-x_0)$, además de un término $(b-a)$ después del desarrollo siguiente

$$\begin{aligned}
& -\frac{\alpha^5}{24}(x_0-a)(b-x_0)\{(x_0-a)^2[(b-x_0) + (x_0-a)] + (b-x_0)^2[(b-x_0) + (x_0-a)] \\
& + 3(x_0-a)^2(b-x_0) + 3(b-x_0)^2(x_0-a)\} = \\
& -\frac{\alpha^5}{24}(x_0-a)(b-x_0)\{[(b-x_0)^2 + (x_0-a)^2](b-a) + 3(b-a)(x_0-a)(b-x_0)\} = \\
& -\frac{\alpha^5}{24}(b-a)(x_0-a)(b-x_0)\{[(b-x_0) + (x_0-a)]^2 + (x_0-a)(b-x_0)\} = \\
& -\frac{\alpha^5}{24}(b-a)(x_0-a)(b-x_0)\{(b-a)^2 + (x_0-a)(b-x_0)\}.
\end{aligned}$$

Este último término es el numerador del cociente, entonces, si s es pequeño se obtiene

$$\frac{\partial \tilde{Q}_0(x_0, s)}{\partial s} = -\frac{\alpha^5(b-a)(x_0-a)(b-x_0)[(b-a)^2 + (b-x_0)(x_0-a)]}{24 D^2 s^5 (b-a)}$$

que se simplifica en

$$\frac{\partial \tilde{Q}_0(x_0, s)}{\partial s} = -\frac{\alpha^5 (b-a)(x-a)(b-x_0)[(b-a)^2 + (b-x_0)(x_0-a)]}{24 D^2 s^5 (b-a)} \quad (\text{J.11})$$

entonces, al multiplicar este resultado por -2 se obtiene $\langle T_0^2(x_0) \rangle$ como se había descrito anteriormente,

$$\langle T_0^2(x_0) \rangle = \frac{(b-x_0)(x_0-a)[(b-a)^2 + (b-x_0)(x_0-a)]}{12D^2}, \quad (\text{J.12})$$

QED.

Referencias

- [1] García, L. Dagdug, L. ,Picquart, M, Vazquez, E. (2010) *Difusión en sistemas biológicos* en L. Dagdug, M. Vinicio (Ed.), *Introducción a la física biológica 2*.
- [2] Martin R Evans et al 2020 *J. Phys. A: Math. Theor.* 53 193001.
- [3] Redner, S. *A Guide to First-Passage Processes*, (Cambridge: Cambridge University Press), 2001.
- [4] Reichl, L. *A Modern Course in Statistical Physics* , Wiley-vch, cuarta edición, 2016.
- [5] Arfken, G. *Métodos Matemáticos para físicos*, Editorial Diana, 1981.
- [6] Eliezer Braun, *Un movimiento en zigzag*, Fondo de cultura económica, segunda edición, 2001
- [7] Gradshteyn I S and Ryzhik I M 1980 *Table of integrals, Series and Products* (New York: Academic)
- [8] Bell W J. 1991 *Searching Behaviour: The Behavioural Ecology of Finding Resorces* (London: Chapman an Hall).
- [9] Robert Zwanzig, *Non equilibrium Statical Mechanics*, Oxford University Press, USA, First edition, 2001.
- [10] Evans M R and Majumdar S N 2011 Difusion with stochastic resetting *Phys. Rev. Lett.* **106** 160601
- [11] Evans M R and Majumdar S N 2011 Difusion with optimal resetting *J. Phys. A: Math. Theor.* **44**.
- [12] Evans M R and Majumdar S N 2018 Run and tumble particle under resetting: a renewal approach *J. Phys. A Math. Theor.***51** 475003.
- [13] S. Hermann and P. Aloois 2010 From persistent random walk to the telegraph noise. *Stoch. Dyn.* **10**, 161.
- [14] Malakar K et al. 2018 Steady state, relaxaion and first-passage properties of a run-and-tumble particle in one dimension *J. Stat. mech.* 043215.
- [15] Pal A, Kundu A and Evans M R 2016 Difusion under time-dependent resetting *J. Phys. A: Math. Theor.***49** 225001
- [16] Evans M R, Majumdar S N and Mallick K 2013 optimal difusive search: nonequilibrium resetting versus equilibrium dynamics *J. Phys. A. math Theor.* **46** 185001.
- [17] Bray A J, Majumdar S N and Scherh G 2013 Persistence and first-passage properties in nonequilibrium systems *Adv. Phys.* **62** 225.
- [18] Maumdar S N and Oshanin G 2018 Spectral content of fractional Brownian motion with stochastic reset *J. Phys. A. Math. Theor.* **51** 345001.
- [19] Arnab Pal and V. V. Prasad 2019 First passage under stochastic resetting in an interval *Phys. Rev. E* **99**, 032123.

- [20] Shlomi Reuveni 2016 Optimal Stochastic Restart Renders Fluctuations in First Passage Times Universal *Phys. Rev. Lett.* **116**, 170601.
- [21] Stanley J.Farlow 1993 *Partial differential equations for scientists and engineers*, Courier Dover Publications, New York.
- [22] Bartumeus F and Catalan J 2009 Optimal search behaviour and classic foraging theory *J. Phys. A: Math. Theor.***42**, 434002.
- [23] Snider J 2012 Optimal random search for a single hidden target *Phys. Rev. E* **83** 011105.