



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA
Unidad Iztapalapa

**Difusión con dos puntos de reinicio y
condición inicial variable**

TESIS QUE PRESENTA:
Fís. Pedro Jesús Julián Salgado
PARA OBTENER EL GRADO DE:
Maestro en Ciencias (Física)

ASESORES:

Dr. Leonardo Dagdug Lima

Dr. Denis Pierre Boyer

Septiembre, 2022

Índice general

Introducción	IV
1. Difusión Libre	1
1.1. Introducción histórica	1
1.2. Descripción Microscópica de la Difusión	2
1.3. Deducción de la ecuación de difusión	4
1.4. Soluciones a la ecuación de difusión	6
1.4.1. Condiciones de Frontera	6
1.4.2. Partícula Browniana con arrastre en un canal unidimensional infinito	7
1.4.3. Densidad de probabilidad con un blanco absorbente en $x = 0$	11
1.4.4. Densidad de probabilidad para una partícula libre confinada por dos paredes absorbentes	12
1.4.5. Dos paredes reflejantes	15
1.5. Probabilidad de supervivencia y tiempo promedio de captura	16
1.5.1. Un blanco absorbente en el origen	16
1.5.2. Utilidad de la transformada de Laplace en procesos de primer arribo	21
1.5.3. Dos paredes absorbentes	21
2. Difusión libre con reinicio	26
2.1. Introducción a la Difusión Browniana con Reinicio	26
2.2. Tiempo promedio de captura con reinicio	32
2.2.1. Deducción de la ecuación Fokker-Planck hacia atrás con reinicio	36
2.2.2. Probabilidad de supervivencia mediante las ecuaciones de renovación	38
3. Difusión con reinicio cuando la posición inicial y de reinicio son diferentes	41
3.1. Formalismo de Fokker-Planck en el sistema de una pared absorbente	41
3.2. Formalismo de ecuaciones de Renovación	44
3.2.1. Efecto de x_0 sobre el tiempo medio de primer arribo	45
3.2.2. Posición inicial distribuida uniformemente	49
3.3. Dos paredes absorbentes	54
3.3.1. Probabilidad de supervivencia en un intervalo $[a,b]$	54
3.4. Tiempo promedio de captura (TPC)	56
3.4.1. Posiciones iniciales distribuidas uniformemente	62

4. Difusión con dos puntos de reinicio	64
4.1. Estado estacionario de no equilibrio	64
4.2. Una pared absorbente	66
4.2.1. Variables adimensionales en el tiempo promedio de captura	69
4.2.2. Optimización del tiempo promedio de captura a m fijo	71
4.2.3. Aplicando teoría de Landau cerca del punto crítico	77
4.2.4. Cota inferior y superior del factor de reescalamiento	80
4.3. Dos paredes absorbentes: Tiempo Promedio de Captura	81
Conclusiones	84
A. Expansión en series de Fourier de $\delta(x - x_0)$	86
B. Difusión libre en un canal unidimensional infinito: Método de la Transformada de Laplace	89

RESUMEN

En este trabajo mostramos que tomar una posición de reinicio, x_r , diferente de la inicial, x_0 , en el problema de difusión con reinicio estocástico, tiene consecuencias no triviales. Este estudio se llevó a cabo para dos casos: uno en el que se tiene un único punto de reinicio, y otro cuando hay dos. Mostramos que cuando la difusión se lleva a cabo en un intervalo semi-infinito unidimensional con un blanco absorbente en el origen, toda tasa de reinicio r^* que minimiza el Tiempo Promedio de Captura (TPC) se encuentra acotada y depende de manera no trivial de la posición inicial y de reinicio. El caso en que la partícula Browniana con reinicio está dentro de un intervalo $[a, b]$, acotado por dos paredes absorbentes también es estudiado. Para este sistema, la premisa $x_r \neq x_0$ tiene como consecuencia incrementar la zona dentro del intervalo donde el reinicio es capaz de optimizar el TPC.

El principal resultado de este trabajo se obtiene de estudiar el problema con dos sitios de reinicio. Para este caso, el estudio del TPC cuando sólo existe una pared absorbente revela un conjunto de transiciones de fase discontinuas para la tasa de reinicio óptima, cuando se varía la posición inicial dejando fija la del segundo punto de reinicio (o viceversa). Estas discontinuidades existen solamente cuando el cociente m entre los pesos de cada punto de reinicio se encuentra en cierto intervalo $[m_c, m'_c]$. La implementación de una expansión tipo Landau cerca del punto crítico para miembros de este conjunto de transiciones, nos permitió confirmar que existe un exponente universal $\beta = \frac{1}{2}$ que relaciona las tasas r^* con las posiciones en cuestión. Los resultados numéricos que justifican este resultado son discutidos.

Introducción

A lo largo y ancho del medio silvestre, una pequeña abeja (*Apis mellifera*, por ejemplo) ha salido de su refugio dejando atrás la seguridad proporcionada por su enjambre dentro del panal. Sus depredadores y el riesgo de quedarse sin abastecimiento de energía hacen que su principal objetivo sea *encontrar*, con el mínimo esfuerzo, las zonas de néctar presentes en los pétalos de las flores [1]. Por otra parte, en un contexto totalmente diferente, durante los años 1939 – 1945 activos aéreos de las fuerzas aliadas *buscaron* en los 336,698 Km^2 del golfo de Vizcaya a los entonces llamados “u-boot” (un abreviado del alemán para *Unterseeboot*), submarinos alemanes que amenazaban hundir embarcaciones mercantes con valiosos suministros para la subsistencia en Gran Bretaña [2]. Dados estos dos pequeños ejemplos uno se puede percatar que los procesos de búsqueda pueden surgir en una miriada de situaciones muy diferentes entre sí, y de cualquier modo seguir teniendo el mismo objetivo: encontrar, con el menor tiempo posible, un blanco objetivo.

En este sentido, los estudios sobre estrategias que optimizan el tiempo de búsqueda de estos procesos han sido diversos y muy fructíferos [3–6]. De este conjunto se destacan aquellas que se han dedicado a explorar métodos de búsqueda intermitente, donde, con movimientos locales se busca activamente el blanco y con movimientos de largo alcance el ente buscador se reubica en otra región del espacio. Un ejemplo de estrategias son las caminatas aleatorias o el movimiento browniano con reinicio estocástico hacia la posición inicial. Un resultado es que gracias al reinicio, el buscador puede en muchas situaciones encontrar su blanco mucho más rápidamente que sin reinicio. Esto ha desencadenado numerosos estudios que investigan el desempeño del reinicio para diferentes escenarios [7–20].

Estos estudios han generado toda un área de estudio que se ha venido expandiendo en los últimos 12 años. Por ejemplo, se publicaron trabajos que investigan los estados estacionarios que emergen debido al mecanismo de reinicio [21–24]. Por otra parte, en [25] se analiza la difusión con reinicio para el caso de una o múltiples partículas con un blanco parcialmente absorbente. La generalización a más de una dimensión espacial para algunos de estos resultados puede ser encontrada en [26]. Incluso temas tan interesantes como la primera y segunda ley de la termodinámica así como potenciales espacio dependientes han sido estudiados y discutidos cuando se incorpora la dinámica del reinicio [27–29]. En consecuencia, múltiples aplicaciones han sido descritas aprovechando la pertinencia del reinicio para modelar las estrategias de búsqueda intermitentes. Estas van desde modelar procesos microscópicos [30, 31] pasando por sistemas biológicos macroscópicos complejos como animales forrajeando [32–34] o caminatas aleatorias en redes con reinicio [35, 36].

Este texto se divide en cuatro capítulos donde se abarcaron diferentes cuestiones acerca de la difusión Browniana con reinicio. En el capítulo 1 se definieron las cantidades relevantes en la

descripción y estudio de la difusión Browniana. Asimismo se abordaron problemas típicos en los que es posible proporcionar una solución analítica que van desde estudiar a la partícula Browniana libre hasta abordar el caso de una partícula Browniana confinada dentro de una “caja”. En el capítulo 2 hacemos una revisión de cómo el agregar el reinicio afecta las propiedades de transporte de una partícula browniana. A lo largo del capítulo 3 se discute y estudia una generalización del proceso de difusión con reinicio cuando la posición donde la partícula Browniana comienza su búsqueda es diferente de aquella a donde reinicia. Finalmente, en el capítulo 4 se expone la principal contribución de este trabajo. Se estudia a cabalidad el tiempo promedio de captura asociado a una partícula Browniana con dos sitios de reinicio cuando esta se encuentra en el intervalo semi-infinito $[0, \infty)$, con una pared absorbente en el origen. El análisis de este problema nos llevó a concluir que la tasa de reinicio que minimiza el tiempo promedio de búsqueda sufre una discontinuidad cuando se varía la posición inicial (o alternativamente, la posición del segundo sitio de reinicio). Además, como veremos en el último capítulo de este texto, la curva crítica asociada a este tipo de transición no siempre existe. Por ende, estableceremos criterios que nos permitan saber cuando la transición en cuestión si posee una curva crítica.

Difusión Libre

1.1. Introducción histórica

Fue en 1828, cuando Robert Brown (1773-1858) publicó sus estudios sobre un tipo de movimiento irregular y aparentemente perpetuo observado en partículas de polen (en primer lugar extraídas de la flor *Clarkia pulchella*) inmersas en el agua. Si bien para la fecha de sus publicaciones ya había reportes sobre este tipo de movimiento, como aquellas por parte de Jan Ingen-Housz (1730-1799), estas eran sólo observaciones sin formalidad científica. Es por esto que a la fecha de este trabajo, al movimiento aleatorio e incesante antes mencionado se le llama Movimiento Browniano y a las partículas inmersas en el solvente, Partículas Brownianas.

Cabe destacar que Brown no atribuyó las causas de este movimiento a agentes externos. Parafraseando sus palabras [37]: *el movimiento aleatorio no tiene origen en corrientes manifestadas por el solvente, tampoco se debe a su lenta evaporación; si no que más bien pertenece a una cualidad intrínseca en la partícula*. Puesto que Brown sabía que las partículas en cuestión eran carentes de vida, decidió concluir que el fenómeno no era un asunto de la Biología, infiriendo así la necesaria intervención de la Física-Matemática en la explicación de este movimiento.

A principios del siglo XX, mentes brillantes dieron luz a una explicación teórica del Movimiento Browniano basada en la naturaleza corpuscular de la materia. Empezando con Albert Einstein (1879-1955), en 1905 publicó su trabajo sobre [38] “ *Investigations on the theory of, the Brownian Movement* ” donde toma en cuenta al Movimiento Browniano como un proceso estocástico que tiene origen en la agitación térmica aleatoria de las moléculas y no como un fenómeno determinista. Además, también logra demostrar que la presión osmótica puede ser deducida desde la teoría cinética molecular del calor. Un resultado remarcable por parte de los trabajos de Einstein fue calcular el desplazamiento cuadrático medio de la partícula, resultado que le permitió calcular el número de Avogadro.

Independientemente, Marian Smoluchowski (1872-1917), seguramente inspirado por las ideas de Ludwig Boltzmann (1844-1906) y por los trabajos de Einstein, publicó en 1906 sus trabajos sobre difusión y Movimiento Browniano. En su trabajo más reconocido [39] estableció los fundamentos del Movimiento Browniano desde el punto de vista de la teoría cinética. Con este trabajo contribuyó de una manera fundamental a la teoría atómica; de hecho fué Arnold Sommerfeld (1868-1951) quien escribió [40]: “*His name will, forever, be associated with the first flowering of atomic theory.*”

Con tales resultados por parte de Einstein y Smoluchowski, aunado a los resultados experimentales de Jean Perrin (1870-1942) sobre la determinación del número de Avogadro predicho en el artículo de Einstein es como finalmente se formarían las bases de la teoría microscópica y su puente con el mundo macroscópico. En 1926 Jean Perrin recibiría el premio Nobel por [41]: “*sus trabajos sobre la estructura discontinua de la materia.*”

A diferencia de Paul Langevin (1872-1946) quien dió una descripción macroscópica del Movimiento Browniano introduciendo un término estocástico en la segunda ley de Newton, los trabajos de Einstein, Smoluchowski y Boltzmann serán recordados por ser los primeros en conciliar el mundo macroscópico con el microscópico.

Este capítulo presenta el movimiento Browniano, sus principales características, y cómo uno puede deducir una ecuación diferencial parcial para la distribución de probabilidad en la posición de la partícula Browniana. Posteriormente, soluciones a esta ecuación son presentadas para diferentes condiciones de frontera. Métodos tradicionales son empleados debido a la relativa sencillez de las ecuaciones presentadas. Sin embargo, el lector interesado puede consultar las referencias [42–45] para una mayor profundidad en las técnicas de la física estadística fuera de equilibrio o si se requiere, revisar [46, 47] para un enfoque biológico con interesantes secciones de física computacional.

1.2. Descripción Microscópica de la Difusión

A continuación deduciremos algunas propiedades fundamentales asociadas a este tipo de movimiento para N partículas sin interacción entre sí.

Consideremos un sistema formado por un conjunto de N partículas Brownianas localizadas en el origen a un tiempo $t = 0$ en una dimensión. En un intervalo Δt las partículas tienen la misma probabilidad de dar un paso a la izquierda o derecha. Además de esto se hacen dos suposiciones importantes:

- i) Las partículas carecen de memoria (una forma de decir que su comportamiento al tiempo t es independiente de aquel mostrado en un tiempo t' , con $t > t'$).
- ii) Las partículas se mueven independientes unas de otras (cumpliéndose sólo a bajas densidades).

Por otra parte, supongamos que la probabilidad de que la partícula dé un salto hacia la derecha Δx es $P_D = 1/2$ mientras que para la izquierda $-\Delta x$ es $P_I = 1/2$, de tal forma que

$$P_D + P_I = 1.$$

Esto es una forma de decir que las partículas no tienen sesgo hacia una dirección en especial.

Se denotará a la posición de la i -ésima partícula después de n pasos como $x_i(n)$. Si la partícula se encuentra en el paso $n - 1$, entonces es factible escribir la ecuación de evolución como

$$x_i(n) = x_i(n - 1) + \eta_n, \quad (1.1)$$

con η_n un desplazamiento aleatorio que vale Δx con probabilidad $1/2$ y $-\Delta x$ con probabilidad $1/2$. Esto se puede interpretar de la siguiente forma: la partícula i se encuentra en $x_i(n - 1)$ para el paso $n - 1$. Debido a que la probabilidad de que dé un salto hacia cualquier dirección es la unidad, a $x_i(n - 1)$ se le suma el desplazamiento η_n . Recordemos que la partícula tiene la misma probabilidad de ir a la izquierda o derecha. Al calcular el desplazamiento promedio¹ $\bar{x}(n)$

$$\bar{x}(n) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i(n), \quad (1.2)$$

con la ecuación (1.1)

$$\bar{x}(n) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i(n - 1) + \eta_n).$$

Por la ley de los grandes números, cuando $N \rightarrow \infty$, se sustituye la suma por el promedio de ensamble. Usando el hecho $\langle \eta_n \rangle = 0$ obtenemos que

$$\langle x(n) \rangle = \langle x(n - 1) \rangle.$$

Es decir, en pasos subsecuentes la posición promedio de las partículas no cambia. Además, ya que la probabilidad de dar un paso hacia la izquierda es la misma que darlo hacia la derecha, la distribución de las partículas es simétrica respecto al origen. Esto se traduce en $\langle x(n) \rangle = 0$. Por lo tanto, como Einstein lo sugirió [38], procederemos a calcular el desplazamiento cuadrático medio $\langle x^2(n) \rangle$:

$$\bar{x}^2(n) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^2(n). \quad (1.3)$$

Sustituyendo (1.1) en la ecuación anterior y desarrollando

$$\bar{x}^2(n) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [x_i(n - 1) + \eta_n]^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [x_i^2(n - 1) \pm 2x_i(n - 1)\eta_n + \eta_n^2].$$

De manera similar a cuando calculamos el promedio y aprovechando que la magnitud de η_n es Δx tenemos

$$\langle x^2(n) \rangle = \langle x_i^2(n - 1) \rangle + \Delta x^2,$$

¹Denotamos a $\bar{x}(n)$ como un promedio aritmético y a $\langle x(n) \rangle$ como un promedio de ensambles realizado a partir de muchas copias del sistema.

de lo cual obtenemos una ecuación de recurrencia para el desplazamiento cuadrático medio en función de los pasos Δx^2 ; por ejemplo si hacemos $n = 1$ y $n = 2$ tendríamos

$$\begin{aligned}\langle x^2(n=1) \rangle &= \Delta x^2 \\ \langle x^2(n=2) \rangle &= 2\Delta x^2 \\ &\cdot \\ &\cdot \\ &\cdot \\ \langle x^2(n) \rangle &= n\Delta x^2,\end{aligned}\tag{1.4}$$

de esta forma si consideramos al tiempo t tomado como todos aquellos pasos n de duración Δt , entonces

$$t = n\Delta t \Rightarrow n = \frac{t}{\Delta t}$$

y podríamos escribir (1.4) como

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

La cantidad $\Delta x^2/\Delta t$ da entrada a la definición de coeficiente de difusión D , el cual típicamente se define como

$$D = \lim_{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta x^2}{2\Delta t},\tag{1.5}$$

de manera que

$$\langle x^2(t) \rangle = 2Dt.\tag{1.6}$$

Del resultado en (1.6) se concluye que el desplazamiento cuadrático medio (el segundo momento, varianza) es lineal en el tiempo t , con constante de proporcionalidad igual a $2D$.

1.3. Deducción de la ecuación de difusión

Se considera una partícula Browniana libre en una dimensión sin restricciones espaciales; además se considera que el espacio es discretizado y que las posiciones son enteras. Supongamos que la probabilidad para que la partícula salte del punto $j + 1$ al punto j sea a , y que sea b para un salto desde $j - 1$ a j . Con la restricción $a + b = 1$. También se denotará a la probabilidad de que la partícula se encuentre en j después de n pasos como $p_n(j)$. La ecuación de evolución para $p_n(j)$ se escribe como

$$p_{n+1}(j) = ap_n(j+1) + bp_n(j-1)$$

donde obviamente se consideran ambas posibilidades para la partícula; tanto de que salte desde el punto $j + 1$ al j como también del punto $j - 1$ a j .

Para pasar al límite continuo se reemplazarán las variables discretas n y j por las variables continuas x y t . Para esto definimos las cantidades Δx y Δt tal que

$$t = n\Delta t$$

y

$$x = j\Delta x$$

por lo cual

$$\begin{aligned} p(j\Delta x, (n+1)\Delta t) &= ap((j+1)\Delta x, n\Delta t) + bp((j+1)\Delta x, n\Delta t) \\ &= ap(x + \Delta x, t) + bp(x - \Delta x, t). \end{aligned} \quad (1.7)$$

Desarrollando en serie de Taylor los términos de la última expresión considerando que $\Delta t, \Delta x \ll 1$, se tiene

$$\begin{aligned} p(j\Delta x, (n+1)\Delta t) &= p(x, t + \Delta t) = p(x, t) + \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} \Delta t + O(\Delta t^2) \\ p(x + \Delta x, t) &= p(x, t) + \frac{\partial p(x, t)}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} \Delta x^2 + O(\Delta x^3) \\ p(x - \Delta x, t) &= p(x, t) - \frac{\partial p(x, t)}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} \Delta x^2 + O(\Delta x^3), \end{aligned}$$

y sustituyendo en (1.7) obtenemos

$$\begin{aligned} p(x, t) + \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} \Delta t + O(\Delta t^2) &= a \left(p(x, t) + \frac{\partial p(x, t)}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} \Delta x^2 + O(\Delta x^3) \right) \\ &\quad + b \left(p(x, t) - \frac{\partial p(x, t)}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} \Delta x^2 + O(\Delta x^3) \right) \end{aligned}$$

y después de truncar hasta segundo orden en la posición y primero en el tiempo aparece una expresión similar a la ecuación de difusión libre

$$p(x, t) + \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} \Delta t = p(x, t) + (a - b) \frac{\partial p}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \Delta x^2$$

ó

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = \frac{(a - b) \Delta x}{\Delta t} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2\Delta t} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}. \quad (1.8)$$

Cuando se hace tender Δx y Δt a 0 es conveniente definir las nuevas constantes como

$$D = \lim_{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta x^2}{2\Delta t}$$

y

$$v = - \lim_{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0} \frac{(a - b) \Delta x}{\Delta t},$$

de tal manera que la ecuación (1.8) ahora tiene la forma

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial p}{\partial x} + D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}. \quad (1.9)$$

De (1.9) se nota que el efecto de tomar un sesgo ($a \neq b$) es producir un término de arrastre. Por otro lado si $a = b$, (1.9) se convierte en la segunda ley de Fick ó ecuación de difusión libre (para la probabilidad de encontrar a la partícula Browniana en la posición x al tiempo t)

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \quad (1.10)$$

con D el coeficiente de difusión del medio. Si hay N partículas Brownianas independientes entonces la ecuación (1.10) describe la difusión en la concentración de partículas $c(x, t)$:

$$\frac{\partial c(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2}. \quad (1.11)$$

La ecuación análoga en 3 dimensiones sería

$$\frac{\partial c(\vec{r}, t)}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 c(\vec{r}, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c(\vec{r}, t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c(\vec{r}, t)}{\partial z^2} \right) = D \nabla^2 c(\vec{r}, t), \quad (1.12)$$

donde ahora el coeficiente de difusión D se define como

$$D = \lim_{\Delta t, \Delta \vec{r} \rightarrow 0} \frac{1}{6} \frac{|\Delta \vec{r}|^2}{\Delta t},$$

ya que se ha supuesto un medio difusivo isótropo donde se cumple que

$$D_x = D_y = D_z$$

con D_i los coeficientes de difusión en cada una de las direcciones cartesianas. Ahora, la ecuación que relaciona el desplazamiento cuadrático promedio

$$\langle \Delta \vec{r}^2 \rangle = 2D_x \Delta t + 2D_y \Delta t + 2D_z \Delta t$$

se convierte en

$$\langle \Delta \vec{r}^2 \rangle = 6D \Delta t.$$

1.4. Soluciones a la ecuación de difusión

1.4.1. Condiciones de Frontera

En esta sección se abordarán sistemas confinados, es decir, existen fronteras que delimitan al sistema, las cuales interactúan con las partículas ya sea absorbiéndolas, reflejándolas ó aportando más partículas. Tenemos los siguientes casos para los distintos tipos de fronteras:

i) Fronteras absorbentes: capaces de remover cualquier cantidad de partículas con las que entre en contacto, esto se expresa como una condición de Dirichlet

$$c(\vec{r}, t) = 0 \text{ en las fronteras.}$$

ii) Fronteras reflejantes: la pared reflejante impide el paso de las partículas, no puede existir un flujo a través de estas fronteras, por lo tanto [46]

$$\vec{J} = -D \nabla c \cdot \hat{n}|_{\text{fronteras}} = 0.$$

donde \hat{n} es el vector normal a la pared reflejante.

1.4.2. Partícula Browniana con arrastre en un canal unidimensional infinito

En este primer acercamiento a la solución dependiente del tiempo de la ecuación (1.10), se plantea estudiar la difusión de una partícula con arrastre a lo largo de una línea infinita con $x \in (-\infty, \infty)$, usando el método de la transformada de Fourier². En este texto definimos la transformada de Fourier como [48]

$$f(\omega) = F[f(x)] \equiv \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{i\omega x} dx, \quad (1.13)$$

la ecuación (1.9) para la concentración queda de la siguiente manera

$$F\left[\frac{\partial c(x,t)}{\partial t}\right] = F\left[D\frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2}\right] - F\left[v\frac{\partial c(x,t)}{\partial x}\right]. \quad (1.14)$$

El término del lado izquierdo al aplicarle la definición (1.13) es

$$\begin{aligned} F\left[\frac{\partial c(x,t)}{\partial t}\right] &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial c(x,t)}{\partial t} e^{i\omega x} dx \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} c(x,t) e^{i\omega x} dx \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \tilde{c}(\omega, t), \end{aligned} \quad (1.15)$$

donde al pasar de la primera a la segunda línea se tomó en cuenta que $c(x,t)$ es una función continua y diferenciable. Esto para poder hacer conmutar los operadores de integración y el operador de derivada parcial con respecto al tiempo; además se aplicó la definición

$$\tilde{c}(\omega, t) = \int_{-\infty}^{\infty} c(x,t) e^{i\omega x} dx.$$

Prosiguiendo en nuestro método de solución, ahora lidiemos con el primer término del lado derecho de (1.14)

$$F\left[\frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2}\right] = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2} e^{i\omega x} dx,$$

integrando por partes

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2} e^{-i\omega x} dx = \left[e^{i\omega x} \frac{\partial c}{\partial x} \right]_{-\infty}^{\infty} - i\omega \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega x} \frac{\partial c}{\partial x} dx,$$

si el flujo es cero para $x \rightarrow \infty$ y $x \rightarrow -\infty$, entonces $\left[e^{i\omega x} \frac{\partial c}{\partial x} \right]_{-\infty}^{\infty} \rightarrow 0$, integrando el término faltante por partes una vez más

$$-i\omega \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega x} \frac{\partial c}{\partial x} dx = \left[-i\omega e^{i\omega x} c(x,t) \right]_{-\infty}^{\infty} - \omega^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega x} c(x,t) dx,$$

²Existen muchos otros métodos de solución, cada uno con sus diferentes propiedades y ventajas. Por ejemplo, en el apéndice B se aborda este mismo problema mediante la transformada de Laplace.

al hacer la concentración 0 en los extremos el primer término del lado derecho tiende a cero y sólo nos quedamos con

$$\begin{aligned} -i\omega \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega x} \frac{\partial c}{\partial x} dx &= -\omega^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega x} c(x, t) dx = -\omega^2 \tilde{c}(\omega, t) \\ \therefore DF \left[\frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2} \right] &= -D\omega^2 \tilde{c}(\omega, t). \end{aligned} \quad (1.16)$$

Por último tenemos al término de arrastre, integrando por partes

$$\begin{aligned} F \left[v \frac{\partial c(x, t)}{\partial x} \right] &= v \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega x} \frac{\partial c(x, t)}{\partial x} dx \\ &= v \left[e^{i\omega x} c(x, t) \right]_{-\infty}^{\infty} - i\omega v \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega x} c(x, t) dx \\ &= -i\omega v \tilde{c}(\omega, t). \end{aligned} \quad (1.17)$$

Sustituyendo (1.15), (1.16) y (1.17) en (1.14)

$$\frac{\partial}{\partial t} c(\omega, t) = -D\omega^2 \tilde{c}(\omega, t) + i\omega v \tilde{c}(\omega, t)$$

ó

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{c}(\omega, t) = \tilde{c}(\omega, t) [i\omega v - D\omega^2].$$

Resolviendo por variable separable, la ecuación anterior tiene una solución tipo

$$\ln \frac{\tilde{c}(\omega, t)}{c_0} = [i\omega v - D\omega^2] t$$

y en forma exponencial tenemos

$$\tilde{c}(\omega, t) = c_0 e^{[i\omega v - D\omega^2] t}.$$

Aplicando la condición inicial $c(x, t = 0) = N\delta(x - x_0)$, la transformada de Fourier \tilde{c} se traduce en

$$\tilde{c}(\omega, t = 0) = N \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) e^{i\omega x} dx = N e^{i\omega x_0}.$$

Imponiendo lo anterior se obtiene que

$$\tilde{c}(\omega, t) = N e^{[i\omega v - D\omega^2] t + i\omega x_0} \quad (1.18)$$

Ahora se aplica la transformada inversa

$$f(x) = F^{-1}[g(\omega)] = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} g(\omega) e^{-i\omega x} d\omega$$

a la solución en (1.18):

$$c(x, t) = \frac{N}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{[i\omega v - D\omega^2] t + i\omega x_0} e^{-i\omega x} d\omega,$$

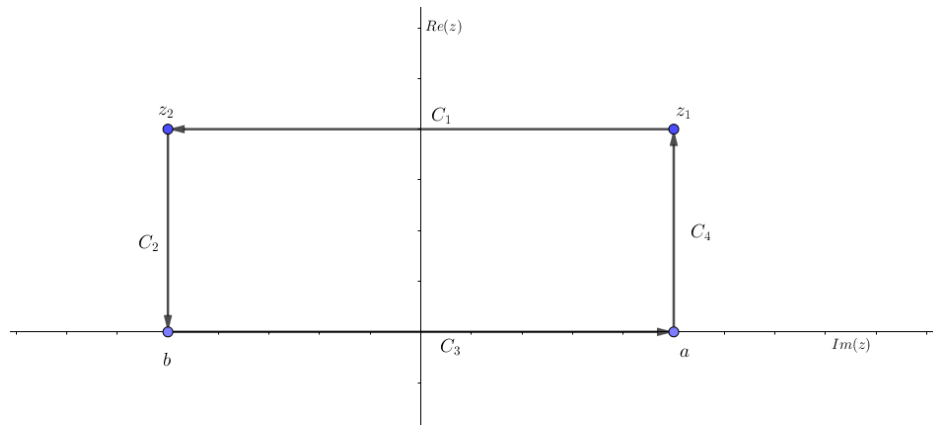


Figura 1.1: Contorno de integración en el plano complejo.

que al completar el cuadrado nos queda como

$$\begin{aligned} c(x, t) &= \frac{N}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -Dt \left[\omega + \frac{i}{2Dt} (x - vt - x_0) \right]^2 \right\} e^{-Dt \left[\frac{1}{2Dt} (x - vt - x_0) \right]^2} d\omega \\ &= \frac{N}{2\pi} e^{-Dt \left[\frac{1}{2Dt} (x - vt - x_0) \right]^2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -Dt \left[\omega + \frac{i}{2Dt} (x - vt - x_0) \right]^2 \right\} d\omega. \end{aligned}$$

Ahora se hace el siguiente cambio de variable

$$\begin{aligned} z &= \omega + \frac{i}{2Dt} (x - vt - x_0) \\ dz &= d\omega, \end{aligned}$$

con esto se obtiene

$$c(x, t) = \frac{N}{2\pi} e^{-Dt \left[\frac{1}{2Dt} (x - vt - x_0) \right]^2} \int_{-\infty + \frac{i}{2Dt} (x - vt - x_0)}^{\infty + \frac{i}{2Dt} (x - vt - x_0)} e^{-Dtz^2} dz. \quad (1.19)$$

La integral anterior se evalúa en el plano complejo, además se considera a

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

como una función de variable compleja $z = x + iy$. El contorno de integración de la Fig.1.1 se tendrá en cuenta dónde a y b son puntos arbitrarios en la recta real; más adelante tanto a como b se harán tender a infinito para recobrar los límites de integración dados en (1.19), además se hará uso del teorema de Cauchy:

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

en vista de que nuestra función $f(z)$ es analítica en todo el dominio de integración considerado. La curva C se puede dividir en cuatro curvas como se muestra en la figura, de tal manera que

$$\oint_C f(z) dz = \int_{C_1} f(z) dz + \int_{C_2} f(z) dz + \int_{C_3} f(z) dz + \int_{C_4} f(z) dz = 0. \quad (1.20)$$

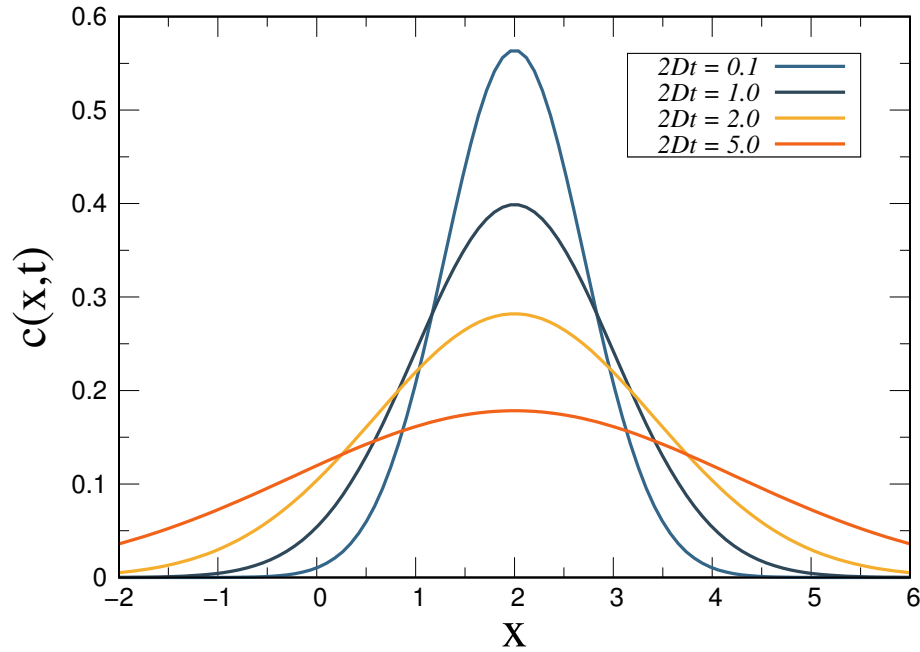


Figura 1.2: Conforme pasa el tiempo la partícula tiende a esparcirse por todo el espacio disponible, la probabilidad de que se encuentre en algún punto muy alejado de su posición inicial es minúscula pero diferente de cero. Se ha hecho $v = 0$ y se ha escogido $x_0 = 2$.

Las integrales para las curvas C_2 y C_4 tienden a 0 una vez a y b se hacen tender a infinito por lo siguiente

$$\begin{aligned} \int_{C_2} f(z) dz &= \int e^{-Dtz^2} dz = \int e^{-Dt(w+iy)^2} dz = \int_{-\frac{(x+vt)}{2Dt}}^0 e^{-Dt(a+iy)^2} dy \\ &= e^{-Dta^2} \int_{-\frac{(x+vt)}{2Dt}}^0 e^{-2iDtay} e^{Dty^2} dy \rightarrow 0 \text{ si } a \rightarrow \pm\infty \end{aligned}$$

y similarmente para la curva C_4 . Esto sólo nos deja con dos integrales igualadas a 0 según (1.20)

$$\begin{aligned} \int_{C_1} f(z) dz + \int_{C_3} f(z) dz &= 0 \\ \int_{C_3} f(z) dz &= - \int_{C_1} f(z) dz, \end{aligned}$$

es decir que la integral que estamos buscando con a y b tendiendo a infinito

$$\int_{C_3} f(z) dz$$

puede ser sustituida por

$$- \int_{C_1} f(z) dz,$$

esto es

$$\int_{z_1=-\infty+\frac{i}{2Dt}(x-vt-x_0)}^{z_2=\infty+\frac{i}{2Dt}(x-vt-x_0)} f(z) dz = - \int_{C_1} f(z) dz = - \int_{\infty}^{-\infty} e^{-Dt z^2} dz = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dt z^2} dz,$$

dónde la orientación de la curva C_1 se ha tomado en contra de las manecillas del reloj. Sustituyendo la igualdad anterior en (1.19)

$$c(x, t) = \frac{N}{2\pi} e^{-Dt[\frac{1}{2Dt}(x-vt-x_0)]^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dt z^2} dz$$

y recordando que

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha t^2} dt = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}},$$

la solución para la concentración se reduce a

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

ó

$$c(x, t) = \frac{N}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{1}{4Dt}(x-vt-x_0)^2} = Np(x, t) \quad (1.21)$$

De esta solución concluimos que cuando t aumenta la distribución se hace ancha, el ancho incrementa a según su desviación estándar $\delta = \sqrt{2Dt}$, dejando el área bajo la curva constante. Ver [Fig.1.2]. Destaquemos que en la literatura, al resultado en (1.21) con $v = 0$ se le suele llamar propagador de difusión libre. Este propagador jugará un papel fundamental en las ecuaciones de renovación, tema que abordaremos en secciones posteriores.

1.4.3. Densidad de probabilidad con un blanco absorbente en $x = 0$

Como ejemplo de utilidad de la última solución, construyamos la concentración para un sistema en el que existe un blanco absorbente en $x_T = 0$. Uno podría regresar directamente a la ecuación de Fokker-Planck y buscar la solución a este sistema imponiendo la condición de frontera adecuada, aquella donde la concentración es cero en este punto: $c(x = 0, t) = 0$. Sin embargo uno puede explotar la simetría del problema y construir la solución usando el propagador de difusión libre y el método de las imágenes.

Primero trabajemos con las simetrías que se pueden encontrar en la estructura del propagador de difusión libre. Notemos que la densidad de probabilidad encontrada para la difusión libre es una función simétrica, esto es $p(x + x_0, t|x_0) = p(x_0 - x, t|x_0)$; este hecho nos da la pauta para proponer separar en dos segmentos semi-infinitos al problema en cuestión con un blanco absorbente en $x = 0$. Esto es con la condición de que la solución $p_-(x, t|x_0)$ perteneciente al dominio $(-\infty, 0]$ superpuesta con aquella $p_+(x, t|x_0)$ donde $x \in [0, \infty)$ sea cero en $x = 0$

$$P(x, t|x_0) = Ap_-(x, t|x_0) + Bp_+(x, t|x_0), \quad (1.22)$$

las constantes A y B aseguran la superposición de ambas soluciones y también la cancelación mutua por parte de $p_-(x, t|x_0)$ y $p_+(x, t|x_0)$ en $x = 0$. De acuerdo a este criterio uno puede elegir

$B = -A$ y escoger $B = 1$ (con una partícula) tal que de acuerdo a (1.21) y (1.22) la solución a este sistema se pueda escribir como

$$P(x, t|x_0) = -\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{1}{4Dt}(-x-x_0)^2} + \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{1}{4Dt}(x-x_0)^2}, \quad (1.23)$$

donde obviamente $P(x, t|x_0)$ cumple con la condición de frontera $x = 0$. Veamos si también cumple con la ecuación de difusión

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(x, t|x_0)}{\partial t} &= \frac{t^{-3/2}}{2\sqrt{4\pi D}} \left[e^{-\frac{1}{4Dt}(x-x_0)^2} - e^{-\frac{1}{4Dt}(-x-x_0)^2} \right] \\ &+ \frac{t^{-3/2}}{2\sqrt{4\pi D}} \left[\frac{t^{-1}(-x-x_0)^2 e^{-\frac{1}{4Dt}(-x-x_0)^2}}{2D} - \frac{t^{-1}(x-x_0)^2 e^{-\frac{1}{4Dt}(x-x_0)^2}}{2D} \right] \end{aligned}$$

y derivando con respecto a x dos veces uno puede llegar después de algunos pasos algebraicos a la expresión

$$\begin{aligned} D \frac{\partial^2 P(x, t|x_0)}{\partial x^2} &= \frac{t^{-3/2}}{2\sqrt{4\pi D}} \left[e^{-\frac{1}{4Dt}(-x-x_0)^2} - e^{-\frac{1}{4Dt}(x-x_0)^2} \right] \\ &+ \frac{t^{-3/2}}{2\sqrt{4\pi D}} \left[\frac{(x-x_0)^2 e^{-\frac{1}{4Dt}(x-x_0)^2}}{2Dt} - \frac{(x+x_0)^2 e^{-\frac{1}{4Dt}(-x-x_0)^2}}{2Dt} \right], \end{aligned}$$

hecho desde lo cual se puede concluir que efectivamente $\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}$; y concluir en base al teorema de existencia y unicidad dentro de la teoría de ecuaciones diferenciales que $P(x, t|x_0)$ dado por (1.23) es solución única a la ecuación de difusión con su correspondiente condición de frontera en $x = 0$.

1.4.4. Densidad de probabilidad para una partícula libre confinada por dos paredes absorbentes

Hasta ahora se ha estudiado la estructura de la densidad de probabilidad asociada a sistemas semi-confinados en los que la partícula puede difundirse libremente hacia una frontera o en el intervalo $x \in (-\infty, \infty)$. Sin embargo, también se puede encontrar $p(x, t)$ en un sistema donde la partícula se encuentra dentro de una caja con paredes completamente absorbentes. Posteriormente se obtienen cantidades de primer arribo pertinentes, asociadas a los sistemas que se han descrito.

Podemos iniciar el planteamiento del problema desde la ecuación de Fokker-Planck

$$\frac{\partial p(x, t|x_0)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p(x, t|x_0)}{\partial x^2} \quad (1.24)$$

donde la posición de la partícula sólo puede existir en el intervalo $[a, b]$ con condiciones de frontera $p(x = a) = p(x = b) = 0$ y con un perfil inicial $p_0(t = 0) = \delta(x - x_0)$. Para la solución de este problema, usaremos el método de separación de variables. Como primer paso, proponemos que la solución de (1.24) tenga la forma

$$p(x, t|x_0) = f(x) g(t) \quad (1.25)$$

con condiciones de frontera $f(x = a) = f(x = b) = 0$. Al sustituir en (1.24) observamos que ambos lados de la ecuación sólo pueden ser igual a una constante

$$\frac{1}{g(t)} \frac{dg(t)}{dt} = \frac{D}{f(x)} \frac{d^2 f(x)}{dx^2} = -\lambda,$$

de aquí que se obtengan dos ecuaciones ordinarias

$$\begin{aligned} \frac{1}{g(t)} \frac{dg(t)}{dt} &= -\lambda \\ \frac{D}{f(x)} \frac{d^2 f(x)}{dx^2} &= -\lambda. \end{aligned}$$

La primera ecuación tiene solución inmediata

$$g(t) = Ce^{-\lambda t}, \quad (1.26)$$

mientras que la segunda tiene solución de tipo oscilador armónico (considerando $\lambda \geq 0$)

$$f(x) = A \cos \nu x + B \sin \nu x \quad (1.27)$$

dónde definimos $\nu^2 = \lambda/D$. Es relativamente fácil aplicar las condiciones de frontera a una expresión como la anterior

$$f(x = a) = 0 = A \cos \nu a + B \sin \nu a \Rightarrow A = -B \tan \nu a,$$

y después de sustituir en (1.27) encontramos que

$$f(x) = B(\sin \nu x - \tan \nu a \cos \nu x).$$

Pero al evaluar en $x = b$ se tiene

$$f(x = b) = 0 = A(\sin \nu b - \tan \nu a \cos \nu b),$$

e ignorando la solución trivial $A = 0$ podemos concluir que si f es idénticamente cero en $x = b$, entonces se tiene que cumplir lo siguiente

$$\begin{aligned} \tan \nu a \cos \nu b &= \sin \nu b \Rightarrow \sin \nu b \cos \nu a - \sin \nu a \cos \nu b = 0 \\ \therefore \sin \nu(b - a) &= 0 \iff \nu(b - a) = n\pi \text{ con } n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

pero $\nu = \sqrt{\lambda/D}$, entonces la constante λ se puede expresar como λ_n con $n = 0, 1, 2, \dots$

$$\lambda_n = \frac{n^2 \pi^2 D}{(b - a)^2}, \quad (1.28)$$

con esto las soluciones en (1.27) y (1.28) se reescriben como

$$\begin{aligned} g(t) &= Ce^{-\frac{n^2 \pi^2 D}{(b-a)^2} t} \\ f(x) &= B \left(\sin \left(\frac{n\pi x}{b-a} \right) - \tan \left(\frac{n\pi a}{b-a} \right) \cos \left(\frac{n\pi x}{b-a} \right) \right). \end{aligned}$$

Sin embargo, mediante manipulaciones trigonométricas uno puede simplificar la función $f(x)$ como sigue

$$\begin{aligned} \sin\left(\frac{n\pi x}{b-a}\right) - \tan\left(\frac{n\pi a}{b-a}\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{b-a}\right) &= \sin\left(\frac{n\pi x}{b-a}\right) - \frac{\sin\left(\frac{n\pi a}{b-a}\right)}{\cos\left(\frac{n\pi a}{b-a}\right)} \cos\left(\frac{n\pi x}{b-a}\right) \\ &= \sin\left(\frac{n\pi x}{b-a}\right) - \left[\frac{\sin\left(\frac{n\pi x}{b-a}\right)}{\cos\left(\frac{n\pi a}{b-a}\right)} \cos\left(\frac{n\pi a}{b-a}\right) - \frac{\sin\left(\frac{n\pi(x-a)}{b-a}\right)}{\cos\left(\frac{n\pi a}{b-a}\right)} \right] \\ &= \sin\left(\frac{n\pi(x-a)}{b-a}\right) \end{aligned}$$

y después de sustituir en la solución general (1.25) nos queda la solución buscada salvo una constante

$$p_n(x, t|x_0) = C'_n \sin\left(\frac{n\pi(x-a)}{b-a}\right) e^{-\frac{n^2\pi^2 D}{(b-a)^2} t}. \quad (1.29)$$

Por otra parte, la ecuación (1.29) es solución para cualquier n , y entonces la suma sobre todas las posibles n también es solución

$$p(x, t|x_0) = \sum_{n=0}^{\infty} C'_n \sin\left(\frac{n\pi(x-a)}{b-a}\right) e^{-\frac{n^2\pi^2 D}{(b-a)^2} t}, \quad (1.30)$$

la constante C'_n se puede obtener usando la condición inicial $p(t=0) = \delta(x-x_0)$:

$$\frac{2}{b-a} \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{n\pi(x-a)}{b-a}\right) \sin\left(\frac{n\pi(x_0-a)}{b-a}\right) = \sum_{n=1}^{\infty} A'_n \sin\left(\frac{n\pi(x-a)}{b-a}\right) = p(x, 0|x_0), \quad (1.31)$$

donde hemos usado la representación en series de Fourier de la delta de Dirac para el intervalo $[a, b]$

$$\delta(x-x_0) = \frac{2}{b-a} \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{n\pi(x-a)}{b-a}\right) \sin\left(\frac{n\pi(x_0-a)}{b-a}\right)$$

con $b-a$ el largo del intervalo suponiendo $b > a$ y empezando desde $n=1$ en la solución de $p(x, t|x_0)$ porque el término con $n=0$ es nulo. De (1.31) se deja ver que la constante C'_n tiene que cumplir

$$\frac{2}{b-a} \sin\left(\frac{n\pi(x-a)}{b-a}\right) \sin\left(\frac{n\pi(x_0-a)}{b-a}\right) = A'_n \sin\left(\frac{n\pi(x-a)}{b-a}\right), \quad (1.32)$$

es decir

$$C'_n = \frac{2}{b-a} \sin\left(\frac{n\pi(x_0-a)}{b-a}\right).$$

De aquí que (1.30), la solución general para $p(x, t|x_0)$ sea

$$p(x, t|x_0) = \frac{2}{b-a} \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{n\pi(x_0-a)}{b-a}\right) \sin\left(\frac{n\pi(x-a)}{b-a}\right) e^{-\frac{n^2\pi^2 D}{(b-a)^2} t}. \quad (1.33)$$

No es de extrañar el factor exponencial decreciente con el tiempo, el sistema tiene dos paredes absorbentes y es comprensible que la probabilidad de encontrar a la partícula para tiempos muy grandes tienda a decrecer de esta manera.

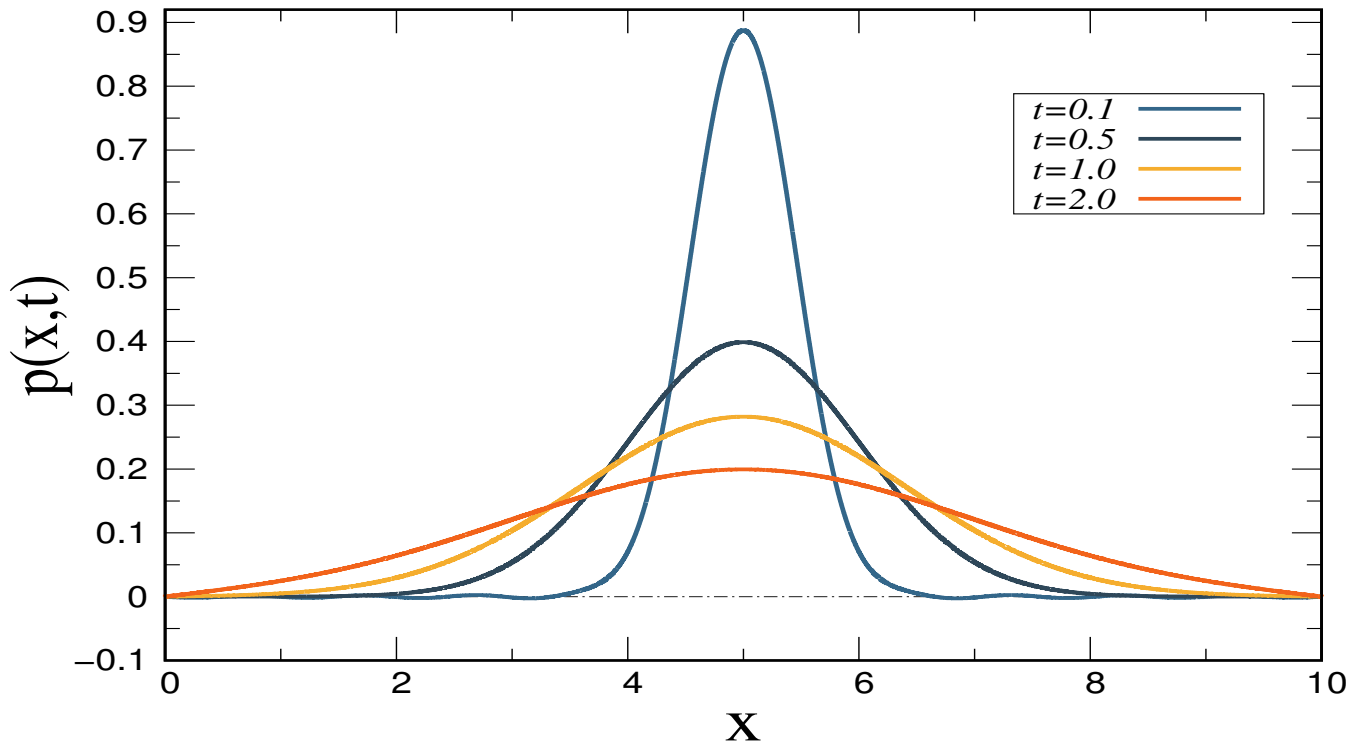


Figura 1.3: Se ha graficado la solución (1.33) para diferentes valores del tiempo. Conforme pasa el tiempo la densidad de probabilidad tiende a cero. La constante de difusión y posición inicial tienen el valor de 1 y 5, respectivamente.

1.4.5. Dos paredes reflejantes

Por completez, en esta sección se aborda el problema de una partícula Browniana que se difunde en un medio confinado por dos paredes reflejantes en $x = -L$ y $x = L$. Cabe resaltar que el procedimiento para encontrar $p(x, t|x_0)$ en este caso, es el mismo que se utilizó en la sección 1.4.4. Sin embargo la solución general para la parte espacial en (1.27) obedece condiciones de frontera diferentes: ahora procuraremos que el flujo sea nulo, es decir $\partial p(x, t|x_0) / \partial x|_{x=-L, L}$ en la posición de dichas paredes. La primera condición $\partial f(x|x_0) / \partial x|_{x=-L}$ da como resultado $B = -A \tan \nu L$, por otra parte al ignorar la solución trivial $A = 0$, la segunda condición $\partial f(x|x_0) / \partial x|_{x=L}$ impone que $\nu L = n\pi$. Además, puesto que $\nu = \sqrt{\lambda/D}$ por lo tanto la constante de separación se reescribe en términos de n

$$\lambda_n = \frac{n^2 \pi^2 D}{L^2}. \quad (1.34)$$

Este resultado proporciona la solución al modo n de la solución espacial donde el término que contiene $\tan \nu L$ ha desaparecido porque $\tan \nu L = \tan \frac{n\pi}{L} L = \tan n\pi = 0$ y sólo sobrevive aquel del coseno:

$$f_n(x|x_0) = A \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.35)$$

además en virtud de que la parte temporal (1.25) no se ve afectada por las nuevas condiciones de frontera, $g(t)$ tiene la misma forma $g(t) = Ce^{-\lambda_n t} = Ce^{-\frac{n^2\pi^2 D}{L^2} t}$. Así, la solución general a nuestro problema es la combinación lineal de todos los modos normales n

$$p(x, t|x_0) = \sum_{n=0}^{\infty} A'_n \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) e^{-\frac{n^2\pi^2 D}{L^2} t}. \quad (1.36)$$

A'_n es una constante que puede ser calculada nuevamente utilizando la condición inicial. Esto es, al tiempo $t = 0$ la partícula se encuentra en $x = x_0$; hecho que se traduce en $p(x, t = 0|x_0) = \delta(x - x_0)$ donde la función delta de Dirac se puede expandir en serie de Fourier expresada en términos de la función coseno³ como

$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{2L} + \frac{1}{L} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\cos\left[\frac{n\pi}{L}(x - x_0)\right] \right),$$

si se aplica esta condición suponiendo que la partícula siempre comienza su recorrido en $x_0 = 0$ tenemos que

$$p(x, t = 0|x_0 = 0) = A_{n=0} + \sum_{n=1}^{\infty} A_n \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) = \frac{1}{2L} + \frac{1}{L} \sum_{n=1}^{\infty} \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right).$$

Concluimos de inmediato que $A_{n=0} = \frac{1}{2L}$ y también $A_n = \frac{1}{L}$. Finalmente, sustituyendo $A_{n=0}$ y A_n en (1.36) se obtiene la solución final para la densidad de probabilidad

$$p(x, t|x_0) = \frac{1}{2L} + \frac{1}{L} \sum_{n=1}^{\infty} \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) e^{-\frac{n^2\pi^2 D}{L^2} t}. \quad (1.37)$$

Destaquemos de la solución anterior que a diferencia de dos paredes absorbentes, la densidad de probabilidad (1.37) tiene un estado estacionario no nulo. De hecho cuando hacemos $t \rightarrow \infty$ el segundo término de la derecha se hace cero dejándonos sólo con $p(x|x_0) = 1/2L$. La densidad es uniforme en este límite y la partícula tiene la misma probabilidad de ser encontrada a lo largo del canal confinado, ver [Fig. 1.4]. Por otra parte, fuera de este límite, a tiempos menores la posición inicial $x_0 = 0$ es aquella en la que hay más probabilidad de encontrar a la partícula.

1.5. Probabilidad de supervivencia y tiempo promedio de captura

1.5.1. Un blanco absorbente en el origen

Lo más interesante y quizás más importante acerca de procesos de búsqueda en los que un ente busca un blanco es el tiempo que le lleva encontrarlo. Como veremos, el tiempo promedio de captura es una cantidad que estima cual es el tiempo característico que le lleva al ente llegar a un

³Ver apéndice A.

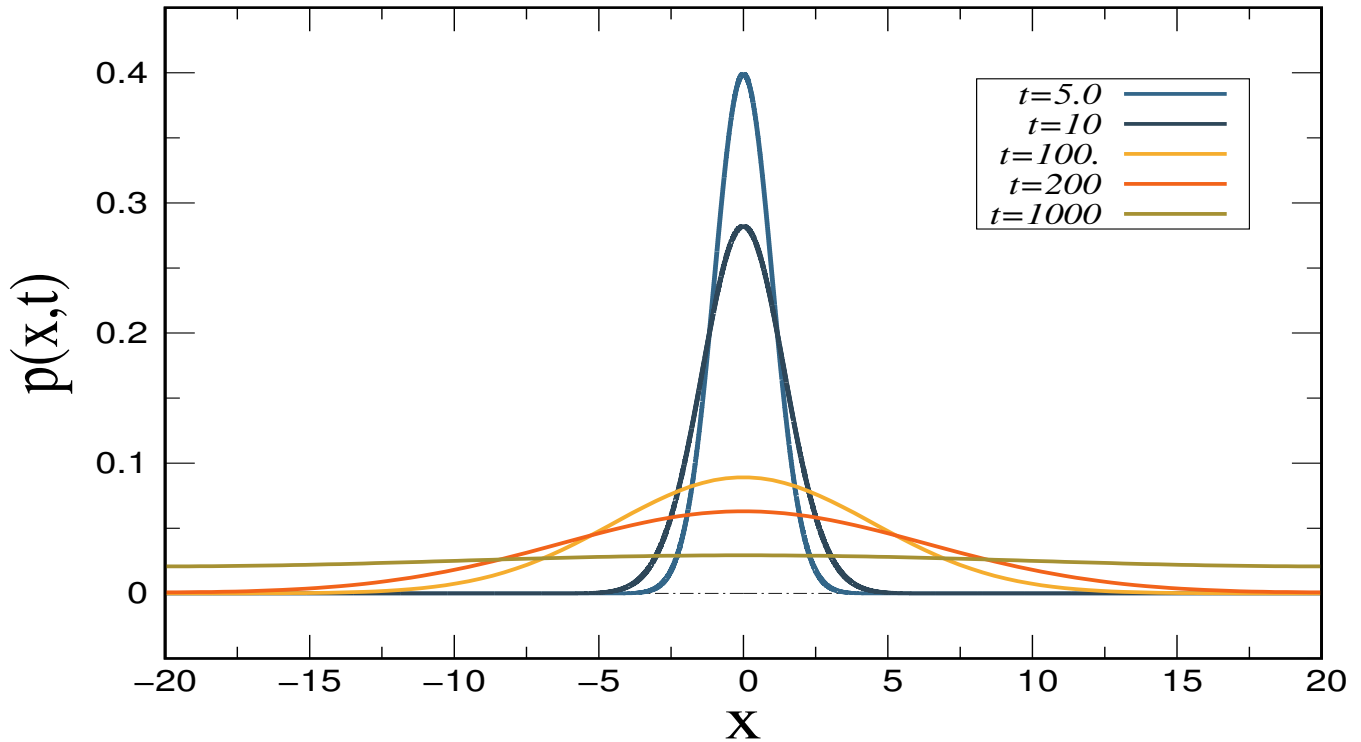


Figura 1.4: La densidad de probabilidad (1.37) tiene un estado estacionario que está representado por la línea dorada. La posición más probable de encontrar a la partícula es alrededor de su posición inicial $x_0 = 0$. Se han ocupado hasta 50 términos de la expansión y los valores de los parámetros $L = 20$ y $D = 1$.

sitio determinado por primera vez. Para obtener esta cantidad se toma el promedio sobre todas las trayectorias hacia el blanco dada una posición inicial fija.

Dado que el movimiento Browniano es un proceso aleatorio, el tiempo de primer arribo asociado a la trayectoria de la partícula, denotado t_f , es por consiguiente una variable aleatoria a la cual le podemos asociar su respectiva densidad de probabilidad denotada por $\mathcal{P}(t_f, x_0)$. Como se mencionó anteriormente, $\mathcal{P}(t_f, x_0)$ debe ser dependiente la posición inicial de la partícula. En lo que sigue se considera un sistema unidimensional en el cual una partícula que parte de la posición inicial x_0 se difunde libremente en el intervalo semi infinito $x \in [0, \infty)$ con una pared absorbente en $x = 0$. Se calculará el tiempo promedio que le toma llegar a esta posición y por tanto salir del sistema.

El tiempo promedio de captura puede ser calculado usando la definición de promedio

$$\langle T(x_0) \rangle = \int_0^{\infty} dt_f t_f \mathcal{P}(t_f, x_0).$$

Sin embargo, en vista de que la variable t_f es siempre positiva puede ser útil considerar la transformada de Laplace

$$\tilde{\mathcal{P}}(s, x_0) = \int_0^{\infty} dt_f e^{-st_f} \mathcal{P}(t_f, x_0). \quad (1.38)$$

En el dominio de Laplace, resulta conveniente desarrollar una ecuación diferencial que describa la evolución de $\tilde{\mathcal{P}}(s, x_0)$. Intuitivamente el procedimiento es bastante sencillo (ver por ejemplo [49]), la forma en que se deriva esta ecuación es partiendo el intervalo $[0, t_f]$ en dos partes: un pequeño intervalo $[0, \Delta\tau]$ en el cual la partícula avanza un desplazamiento Δx (diferente para diferentes trayectorias, es por esto que más adelante se promedia con respecto a todos los desplazamientos Δx), es decir, desde x_0 hasta $x_0 + \Delta x$, y un segundo intervalo $[\Delta\tau, t_f]$ en el cual hipotéticamente la partícula llega al objetivo ubicado en $x = 0$. Debido a que la difusión Browniana no tiene memoria, en la relación (1.38) hacemos el cambio de variable $t_f = t'_f + \Delta\tau$ donde t'_f es el tiempo de primer arribo que parte desde $x_0 + \Delta x$ y que está distribuido de acuerdo a $\mathcal{P}(t'_f, x_0 + \Delta x)$

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{P}}(s, x_0) &\simeq \left\langle \int_0^\infty dt'_f e^{-s(\Delta\tau+t'_f)} \mathcal{P}(t'_f, x_0 + \Delta x) \right\rangle_{\Delta x} = e^{-s\Delta\tau} \left\langle \int_0^\infty dt'_f e^{-st'_f} \mathcal{P}(t'_f, x_0 + \Delta x) \right\rangle_{\Delta x} \\ &= e^{-s\Delta\tau} \left\langle \tilde{\mathcal{P}}(s, x_0 + \Delta x) \right\rangle_{\Delta x},\end{aligned}$$

donde $\langle \rangle_{\Delta x}$ significa el promedio sobre Δx y donde se ha separado el intervalo $\Delta\tau$ tal que ahora la contribución de $\mathcal{P}(t_f, x_0)$ a la transformada de Laplace sólo tome en cuenta trayectorias que empiecen en $x_0 + \Delta x$. Al tomar $\Delta\tau \ll 1$ tal que todos los desplazamientos Δx para todas las trayectorias sean lo suficientemente pequeños para desarrollar $\tilde{\mathcal{P}}(s, x_0 + \Delta x)$ en serie de Taylor, expandimos hasta segundo orden en Δx y primer orden en $\Delta\tau$

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{P}}(s, x_0) &\approx \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-s\Delta\tau)^k}{k!} \right) \left\langle \tilde{\mathcal{P}}(s, x_0) + \frac{\partial \tilde{\mathcal{P}}(s, x_0)}{\partial x_0} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{P}}(s, x_0)}{\partial x_0^2} \Delta x^2 \right\rangle_{\Delta x} \quad (1.39) \\ &\approx (1 - s\Delta\tau) \left\langle \tilde{\mathcal{P}}(s, x_0) + \frac{\partial \tilde{\mathcal{P}}(s, x_0)}{\partial x_0} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{P}}(s, x_0)}{\partial x_0^2} \Delta x^2 \right\rangle_{\Delta x}.\end{aligned}$$

Por lo tanto, la ecuación relevante en esta aproximación es

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{P}}(s, x_0) &\approx (1 - s\Delta\tau) \left\langle \tilde{\mathcal{P}}(s, x_0) + \frac{\partial \tilde{\mathcal{P}}(s, x_0)}{\partial x_0} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{P}}(s, x_0)}{\partial x_0^2} \Delta x^2 \right\rangle_{\Delta x}, \quad (1.40) \\ &= (1 - s\Delta\tau) \tilde{\mathcal{P}}(s, x_0) + (1 - s\Delta\tau) \frac{\partial \tilde{\mathcal{P}}(s, x_0)}{\partial x_0} \langle \Delta x \rangle + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{P}}(s, x_0)}{\partial x_0^2} \langle \Delta x^2 \rangle,\end{aligned}$$

pero de (1.6) deducimos que $\langle \Delta x^2 \rangle = 2D\Delta\tau$ y también considerando que el ruido blanco $\eta(t)$ no tiene sesgo hacia alguna dirección preferencial obtenemos $\langle \Delta x \rangle = 0$. Entonces reescribimos la ecuación anterior como

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{P}}(s, x_0) &\approx (1 - s\Delta\tau) \tilde{\mathcal{P}}(s, x_0) + \frac{1}{2} (1 - s\Delta\tau) \frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{P}}(s, x_0)}{\partial x_0^2} \Delta\tau^2 \frac{2D}{\Delta\tau} \\ &= \tilde{\mathcal{P}}(s, x_0) - s\Delta\tau \tilde{\mathcal{P}}(s, x_0) + D \frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{P}}(s, x_0)}{\partial x_0^2} \Delta\tau - sD \frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{P}}(s, x_0)}{\partial x_0^2} \Delta\tau^2 \\ &= \tilde{\mathcal{P}}(s, x_0) - s\Delta\tau \tilde{\mathcal{P}}(s, x_0) + D \frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{P}}(s, x_0)}{\partial x_0^2} \Delta\tau + O(\Delta\tau^2),\end{aligned}$$

donde se ha despreciado el término cuadrático en $\Delta\tau$. Por tanto deducimos

$$\frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{P}}(s, x_0)}{\partial x_0^2} - \frac{s}{D} \tilde{\mathcal{P}}(s, x_0) = 0 \quad (1.41)$$

que es una ecuación diferencial parcial de segundo orden y lineal en $\tilde{\mathcal{P}}(s, x_0)$. La solución general a (1.41) es bien conocida

$$\tilde{\mathcal{P}}(s, x_0) = A e^{\sqrt{\frac{s}{D}} x_0} + B e^{-\sqrt{\frac{s}{D}} x_0}, \quad (1.42)$$

donde A y B son constantes de integración que se obtienen aplicando las siguientes condiciones a $\tilde{\mathcal{P}}(s, x_0)$ respecto a x_0 :

- i) Cuando $x_0 \rightarrow \infty$ la solución (1.42) no debe diverger (recordar que se ha considerado que $x_0 > 0$). De manera intuitiva $t_f \rightarrow \infty$ cuando la posición $x_0 \rightarrow \infty$, ya que x_0 se aleja cada vez más de $x = 0$. Por tanto la solución se reduce

$$\tilde{\mathcal{P}}(s, x_0) = B e^{-\sqrt{\frac{s}{D}} x_0}. \quad (1.43)$$

- ii) La constante B se encuentra gracias a la condición

$$\tilde{\mathcal{P}}(s, x_0 \rightarrow 0) = 1,$$

lo cual significa que cuando la partícula empieza en el blanco, lo encuentra inmediatamente con probabilidad 1, es decir t_f es delta-distribuida, o $P(t_f) = \delta(t_f)$, cuya transformada de Laplace es 1. Por lo tanto $B = 1$:

$$\tilde{\mathcal{P}}(s, x_0) = e^{-\sqrt{\frac{s}{D}} x_0}. \quad (1.44)$$

Es importante mencionar que otra forma de obtener lo anterior es considerando la **probabilidad de supervivencia** $S_0(x_0, t)$ definida como aquella en que la partícula aún no ha llegado a $x = 0$ al tiempo t cuando empieza en $x = x_0$. De acuerdo a esta definición, la probabilidad de sobrevivir hasta t es equivalente a la probabilidad de que $t_f > t$, es decir, por definición tenemos

$$S_0(t|x_0) = \int_t^\infty dt_f \mathcal{P}(t_f, x_0), \quad (1.45)$$

lo cual puede reducirse a una expresión diferencial si derivamos con respecto t usando la regla de Leibniz

$$\frac{\partial S(t|x_0)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \int_t^A dt_f \mathcal{P}(t_f, x_0) = -\mathcal{P}(t, x_0),$$

donde A es una constante. Entonces,

$$\mathcal{P}(t_f, x_0) = -\frac{\partial S_0(x_0, t)}{\partial t}. \quad (1.46)$$

Esta ecuación es muy general y válida para cualquier proceso, no necesariamente Browniano.

Al sustituir (1.46) en (1.38) e integrar por partes encontramos

$$\tilde{\mathcal{P}}(s, x_0) = - \int_0^\infty dt e^{-st} \frac{\partial S_0(x_0, t)}{\partial t} = \left[-S_0(x_0, t) e^{-st} \right]_0^\infty - s \int_0^\infty dt S_0(x_0, t) e^{-st}.$$

Pero la probabilidad de supervivencia en $t = 0$ tiene que ser 1, por lo tanto

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{P}}(s, x_0) &= 1 - s \int_0^\infty dt S_0(x_0, t) e^{-st}, \\ &= 1 - s q_0(s|x_0). \\ \therefore q_0(s|x_0) &= \frac{1 - \tilde{\mathcal{P}}(s, x_0)}{s} \end{aligned}$$

donde $q_0(s|x_0) = \int_0^\infty dt S_0(x_0, t) e^{-st}$ es la transformada de Laplace para $S_0(x_0, t)$. Haciendo $x_0 \rightarrow 0$, la probabilidad de supervivencia debe ser cero, de aquí que el lado izquierdo de la última ecuación sea cero y recuperemos el resultado $\tilde{\mathcal{P}}(s, x_0 \rightarrow 0) = 1$.

Además, si sustituimos (1.44) en la última ecuación para $q_0(s|x_0)$ obtendremos la expresión analítica para la transformada de Laplace en la probabilidad de supervivencia

$$q_0(s|x_0) = \frac{1 - e^{-\sqrt{\frac{s}{D}}x_0}}{s}, \quad (1.47)$$

ecuación que será muy importante para estudiar el problema del reinicio. De acuerdo a [50], fila 5.30, la transformada de Laplace inversa de (1.47) y por tanto la distribución para el primer tiempo de arribo es

$$\mathcal{P}(t, x_0) = \frac{x_0}{\sqrt{4\pi D}} \frac{e^{-x_0^2/4Dt}}{t^{3/2}}, \quad (1.48)$$

también llamada distribución Lévy-Smirnov (ver por ejemplo el capítulo uno de [51]). Cuando se calcula el tiempo promedio de primer arribo $\langle T(x_0) \rangle$

$$\langle T(x_0) \rangle = \int_0^\infty dt \mathcal{P}(t, x_0) t,$$

se encuentra que

$$\langle T(x_0) \rangle = \frac{x_0}{\sqrt{4\pi D}} \int_0^\infty dt \frac{e^{-x_0^2/4Dt}}{t^{1/2}} \rightarrow \infty \quad (1.49)$$

$\langle T(x_0) \rangle$ diverge porque el integrando decae como $t^{-1/2}$ a t grande.

Se concluye por lo tanto que para el caso de una partícula en difusión libre con $x_0 > 0$, el tiempo promedio de primer arribo al origen diverge; esto significa que en el sistema considerado existen trayectorias accesibles a la partícula en las cuales se embarca en excursiones muy largas hacia x grandes haciendo que $\langle T(x_0) \rangle \rightarrow \infty$. Es decir, existe la certeza de que la partícula llegará al origen con probabilidad 1, pero le tomará un tiempo infinito hacerlo.

1.5.2. Utilidad de la transformada de Laplace en procesos de primer arribo

Una de las razones por la que se usa la transformada de Laplace es porque nos da acceso al comportamiento asintótico cuando $t \rightarrow \infty$. En el dominio de Laplace $t \rightarrow \infty$ significa $s \rightarrow 0$. Es decir, expandiendo (1.47) en serie de Taylor y luego tomando la transformada de Laplace inversa a cada término de esa expansión podemos encontrar una buena aproximación de cómo es el comportamiento asintótico de $S_0(t|x_0)$ sin tener su expresión exacta. Procediendo de la manera mencionada con $e^{-\sqrt{\frac{s}{D}}x_0}$ tenemos

$$e^{-\sqrt{\frac{s}{D}}x_0} = 1 - \left(\sqrt{\frac{s}{D}}\right)x_0 + \frac{1}{2}\left(\frac{s}{D}\right)x_0^2 + O\left(s^{3/2}\right),$$

por lo tanto la ecuación (1.47) puede ser escrita como

$$q(s|x_0) = \frac{1}{s} \left[+ \left(\sqrt{\frac{s}{D}}\right)x_0 - \frac{1}{2}\left(\frac{s}{D}\right)x_0^2 + O\left(s^{3/2}\right) \right] = \frac{x_0}{D^{1/2}s^{1/2}} + O\left(s^0\right), \quad (1.50)$$

pero según [50] fila 2.5 se tiene que $L^{-1}\left[\frac{n!}{s^{n+1}}\right] = t^n$ ó $L^{-1}\left[\frac{1}{s^{n+1}}\right] = \frac{t^n}{\Gamma(n+1)}$, por lo tanto la transformada inversa de (1.50) con $n = -\frac{1}{2}$ en el primer término es

$$S_0(t|x_0)_{t \rightarrow \infty} \approx \frac{x_0}{\Gamma(1/2)t^{1/2}D^{1/2}} = \frac{x_0}{\Gamma(1/2)t^{1/2}D^{1/2}}.$$

La probabilidad de supervivencia a tiempos grandes, por lo tanto, es aproximadamente

$$S_0(t|x_0)_{t \rightarrow \infty} \approx \frac{x_0}{\Gamma(1/2)t^{1/2}D^{1/2}}. \quad (1.51)$$

Una dependencia en ley de potencia inversa $S_0(t|x_0)_{t \rightarrow \infty} \sim t^{-1/2}$ significa un decremento temporal lento. Para ver esto en términos del tiempo promedio de captura, escribamos: $\langle T_0 \rangle = -\int_{t_0}^{t_0+\varepsilon} dt' \frac{S_0(t'|x_0)_{t \rightarrow \infty}}{\partial t'} t' = [-t' S_0(t'|x_0)]_{t_0}^{t_0+\varepsilon} + \int_{t_0}^{t_0+\varepsilon} dt' S_0(t'|x_0)$. Donde t_0 se asume muy grande tal que $S_0(t|x_0)_{t \rightarrow \infty}$ tenga la dependencia funcional (1.51). Sustituyendo (1.51) en la última expresión de $\langle T_0 \rangle$ e integrando, tenemos

$$\begin{aligned} \langle T_0 \rangle_{t \rightarrow \infty} &= \frac{t_0^{1/2} x_0}{\Gamma(1/2) D^{1/2}} - \frac{(t_0 + \varepsilon) x_0}{\Gamma(1/2) (t_0 + \varepsilon)^{1/2} D^{1/2}} + \frac{2x_0}{\Gamma(1/2) D^{1/2}} \left[t'^{1/2} \right]_{t_0}^{t_0+\varepsilon} \\ &= \frac{2x_0 (t_0 + \varepsilon)^{1/2}}{\Gamma(1/2) D^{1/2}} - \frac{t_0^{1/2} x_0}{\Gamma(1/2) D^{1/2}}. \end{aligned}$$

Encontramos que efectivamente $\langle T_0 \rangle$ diverge como una ley de potencia si tomamos el límite $\varepsilon \rightarrow \infty$.

1.5.3. Dos paredes absorbentes

Ahora consideramos una partícula Browniana confinada en un intervalo $[0, L]$ con dos paredes absorbentes en 0 y L . Nos proponemos calcular el tiempo promedio que le lleva a la partícula

encontrar alguna de las dos fronteras. Una de las formas de abordar este problema es mediante el enfoque Fokker-Planck hacia atrás⁴. Este enfoque es fundamental dentro de los procesos de primer arribo, ya que tanto el tiempo promedio y la probabilidad de supervivencia dependen sustancialmente de dónde empiecen las partículas su recorrido. No es lo mismo una posición inicial en la vecindad de las fronteras que en el punto mas alejado de ellas, ver por ejemplo Fig. 1.5. El enfoque Fokker-Planck hacia atrás proporciona una ecuación diferencial parcial tipo difusión simple, donde, la derivada espacial es con respecto a la posición inicial [52]

$$\frac{\partial p(x, t|x_0)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p(x, t|x_0)}{\partial x_0^2}, \quad (1.52)$$

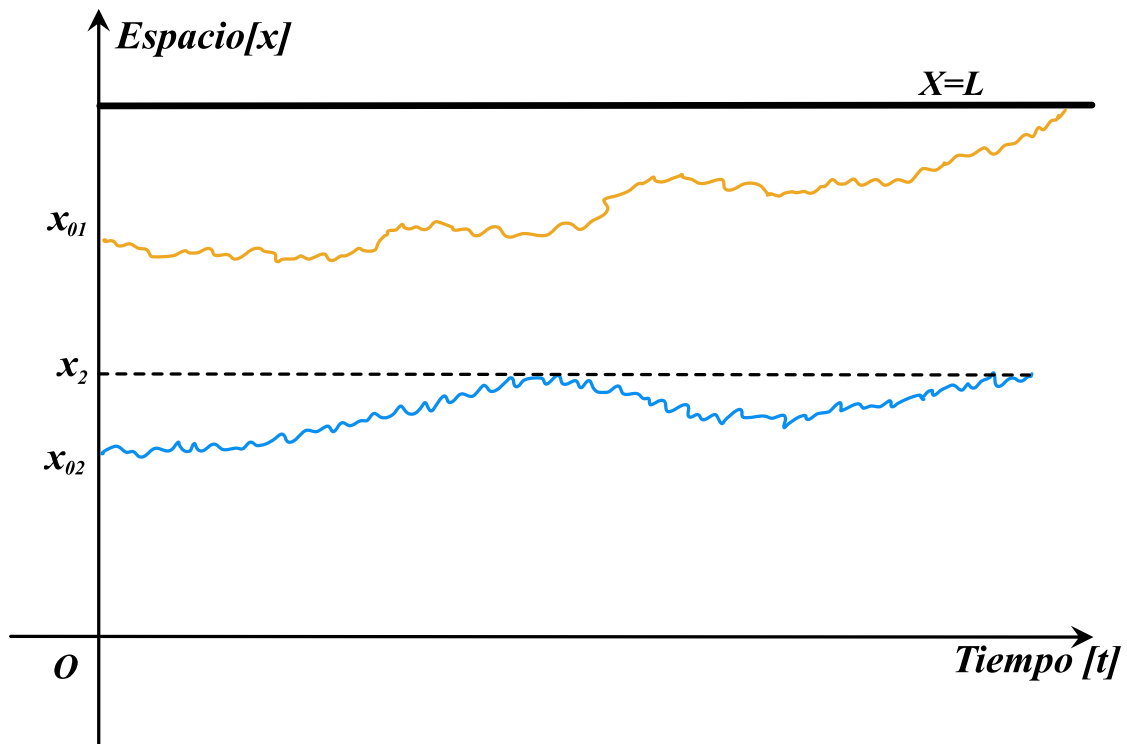


Figura 1.5: Una partícula que comience su trayectoria desde x_{01} tiene una mayor probabilidad de encontrar el blanco en $x = L$ primero y por tanto el tiempo que le lleva es menor que aquella cuya posición inicial es x_{02} .

con $p(x, t|x_0)$ la distribución de probabilidad para el sistema de la partícula Browniana dentro del intervalo $[0, L]$, cuya posición inicial es x_0 . Esta ecuación será de suma importancia en capítulos posteriores cuando abordemos el problema de difusión con reinicio estocástico.

La utilidad de la ecuación (1.52) radica en la propiedad de conmutación por parte de los operadores. Ahora, uno puede integrar (1.52) con respecto a la posición final x , utilizando el hecho

⁴Ver sección 2.2.1.

que la partícula esta confinada en el intervalo $[0, L]$

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

y suponiendo que $p(x, t|x_0)$ es continua y diferenciable sobre todo el intervalo de integración podemos conmutar los operadores integral y diferencial

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^L p(x, t|x_0) dx = D \frac{\partial^2}{\partial x_0^2} \int_0^L p(x, t|x_0) dx. \quad (1.53)$$

Es aquí donde se aprovecha la estructura de esta expresión para darnos cuenta que, por definición,

$$S(t|x_0) = \int_0^L p(x, t|x_0) dx \quad (1.54)$$

es la *probabilidad de supervivencia* escrita en términos de $p(x, t|x_0)$. El rango de integración es $0 \leq x \leq L$, porque es donde la partícula puede existir. La relación que resulta después de sustituir (1.54) en (1.53) es la ecuación Fokker-Planck hacia atrás para la probabilidad de supervivencia

$$\frac{\partial}{\partial t} S(t|x_0) = D \frac{\partial^2}{\partial x_0^2} S(t|x_0). \quad (1.55)$$

En retrospectiva la definición (1.54) es intuitiva, ya que si uno piensa en la probabilidad total que tiene la partícula de sobrevivir en el sistema en cuestión, la primera idea que viene a la mente es “sumar” la probabilidad de encontrar a ésta sobre todas las posiciones disponibles en el sistema; además notemos como $S(t|x_0)$ es fundamentalmente dependiente de dónde comienza la partícula. Ahora integremos con respecto al tiempo la ecuación (1.55), esto genera una relación directa entre el tiempo promedio de captura y la probabilidad de supervivencia

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{\partial}{\partial t} S(t|x_0) dt &= D \int_0^\infty \frac{\partial^2}{\partial x_0^2} S(t|x_0) dt, \\ \Rightarrow [S(t|x_0)]_{t=0}^{t \rightarrow \infty} &= D \frac{\partial^2}{\partial x_0^2} \int_0^\infty S(t|x_0) dt, \end{aligned}$$

ó

$$[S(t|x_0)]_{t=0}^{t \rightarrow \infty} = D \frac{\partial^2}{\partial x_0^2} \langle T(x_0) \rangle \quad (1.56)$$

donde se ha hecho

$$\langle T(x_0) \rangle = \int_0^\infty S(t|x_0) dt. \quad (1.57)$$

A este tiempo también se le conoce como tiempo promedio de supervivencia. Es fácil notar que la probabilidad de supervivencia es 0 cuando $t \rightarrow \infty$: $S(t \rightarrow \infty|x_0) = 0$. Es decir, a tiempos muy grandes la partícula llegará a alguna de las fronteras, donde será absorbida y por ende saldrá del sistema. Por otro lado, al tiempo $t = 0$ la partícula por condición inicial tiene que estar en x_0

(dentro del sistema) con una probabilidad de supervivencia de $S(t=0|x_0) = 1$. Por tanto, estas condiciones conllevan a escribir una ecuación local para el tiempo promedio de primer arribo

$$\begin{aligned} [S(t|x_0)]_{t=0}^{t \rightarrow \infty} &= -1 = D \frac{\partial^2}{\partial x_0^2} \langle T(x_0) \rangle \\ \Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x_0^2} \langle T(x_0) \rangle &= -\frac{1}{D}. \end{aligned} \quad (1.58)$$

Para una partícula difundiéndose en una dimensión entre los puntos $x = 0$ y $x = L$, la ecuación tiene la siguiente solución. Integrando con respecto a x_0 :

$$\frac{\partial}{\partial x_0} \langle T(x_0) \rangle = -\frac{1}{D} x_0 + A_1$$

y luego de integrar una segunda vez obtenemos

$$\langle T(x_0) \rangle = -\frac{1}{2D} x_0^2 + A_1 x_0 + A_2,$$

dónde A_1 y A_2 son constantes de integración. Es claro que en las fronteras $x = 0$ y $x = L$ el tiempo $\langle T(x_0) \rangle$ debe ser cero, pues éstas son absorbentes y si la partícula comienza su recorrido en cualquiera de estas posiciones saldrá inmediatamente del sistema. Imponiendo tales condiciones podemos encontrar las constantes A_1 y A_2 :

$$\begin{aligned} \langle T(x_0 = 0) \rangle &= 0 = A_1 \Rightarrow A_1 = 0 \therefore \langle T \rangle = A_2 x_0 - \frac{x_0^2}{2D}, \\ \langle T(x_0 = L) \rangle &= 0 = A_2 L - \frac{L^2}{2D} \Rightarrow A_2 = \frac{L}{2D}. \end{aligned}$$

Con esto la solución general de (1.58) es

$$\langle T(x_0) \rangle_{abs} = \frac{x_0}{2D} (L - x_0). \quad (1.59)$$

Esta solución nos proporciona el tiempo promedio que tardaría una partícula en salir con puntos absorbentes en $x = 0$ y $x = L$ dada su posición inicial [53].

Para concluir este capítulo, supongamos que uno de los extremos es una frontera reflejante donde la partícula, en vez de salir del sistema, choca contra la pared. La condición de frontera apropiada para $\langle T(x_0) \rangle$ es $\partial \langle T(x_0) \rangle / \partial x_0|_{x_0=L} = 0$ y la solución general $\langle T(x_0) \rangle = -\frac{1}{2D} x_0^2 + A_1 x_0 + A_2$ tiene los siguientes valores para las constantes A_1 y A_2

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \langle T(x_0) \rangle}{\partial x_0} \right|_{x_0=L} &= 0 \Rightarrow A_1 = \frac{L}{D} \\ \langle T(x_0 = 0) \rangle &= 0 \Rightarrow A_2 = 0. \end{aligned}$$

Por lo tanto hemos llegado a la solución

$$\langle T(x_0) \rangle_{ref} = \frac{x_0}{2D} (2L - x_0). \quad 0 \leq x_0 \leq L \quad (1.60)$$

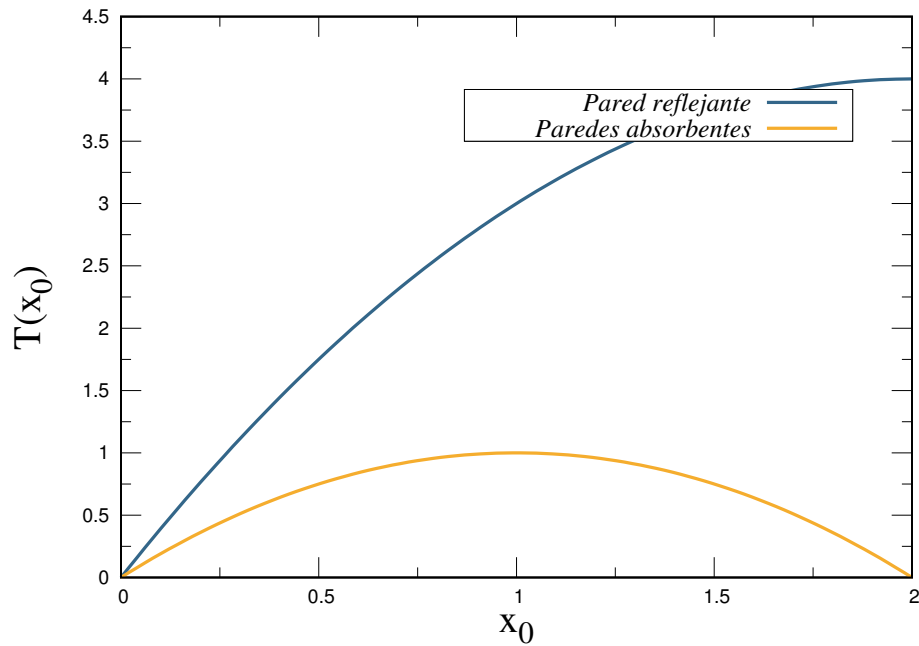


Figura 1.6: Se tabulan las ecuaciones (1.59) y (1.60) con respecto a la posición inicial. Los valores para L y D son 2 y 0.5, respectivamente.

De los resultados en (1.59) y (1.60) podemos concluir que el tiempo promedio de supervivencia en un sistema con una pared absorbente y una reflejante siempre será mayor que aquel con dos absorbentes. De hecho si se hace el cociente $\frac{\langle T(x_0) \rangle_{ref}}{\langle T(x_0) \rangle_{abs}} = \frac{2L-x_0}{L-x_0}$ podemos ver que la razón de esto es porque el caso de una frontera reflejante con una absorbente es como si fueran dos absorbentes pero distanciadas por una longitud $2L$.

En la Fig. 1.6 se muestra la comparación de estos resultados. En el caso de dos paredes absorbentes el tiempo promedio de supervivencia tiene un máximo que corresponde a haber empezado en el punto medio entre las dos fronteras. En el otro caso, su punto máximo (donde justamente la derivada es cero por condición de frontera) es en $x = L$ ya que si la partícula comienza en esta posición tendrá que recorrer toda la distancia L para poder salir del sistema.

Difusión libre con reinicio

2.1. Introducción a la Difusión Browniana con Reinicio

En este capítulo se revisitan algunos resultados de los trabajos [7, 54, 55], ya que consideramos representan un punto de partida excelente para abordar de manera concisa las propiedades más fundamentales y destacadas de la difusión Browniana con reinicio. Para abordar este problema usaremos dos diferentes enfoques: ecuaciones tipo Fokker-Planck y el formalismo de las ecuaciones de renovación. Se demuestra a lo largo de este texto que ambos enfoques proporcionan los mismos resultados, es decir, son equivalentes.

Como punto de partida, pensemos en el cambio de paradigma discutido por Shamik y Arun en [54]. Y es que pensar al movimiento Browniano como uno aleatorio en vez de uno determinista descrito por el formalismo de Newton debió ser un impacto tremendo en la corriente principal de pensamiento científico.

Un camino intuitivo de replantearse este cambio de paradigma es usando el enfoque de Langevin: si consideramos una partícula en un espacio unidimensional en difusión libre, su trayectoria puede ser descrita como un proceso estocástico

$$\frac{dx}{dt} = \eta(t). \quad (2.1)$$

Naturalmente, esta ecuación proviene de la ecuación de Langevin (ver por ejemplo el capítulo uno de [42]) cuando se desprecia el término de aceleración y se considera la ley de Stokes como una fuerza disipativa, la cual es proporcional a la velocidad de la partícula. $\eta(t)$ es una función que representa un proceso aleatorio típicamente llamado ruido blanco Gaussiano y asegura que cualesquiera dos valores de $\eta(t_a)$ y $\eta(t_b)$ son estadísticamente independientes sin importar que t_a y

t_b sean próximos entre sí, es decir no importando que

$$|t_b - t_a| \rightarrow 0.$$

Matemáticamente, estas consideraciones se traducen en

$$\begin{aligned} \langle \eta(t) \rangle &= 0 \\ \langle \eta(t) \eta(t') \rangle &= 2D\delta(t - t') \end{aligned} \quad (2.2)$$

donde $\langle \eta(t) \rangle = 0$ describe una distribución simétrica y el segundo momento, además de establecer la “fuerza” del ruido como $2D$, también expresa la independencia en la trayectoria a tiempos distintos. Es decir, no hay correlación entre ellos excepto si $t = t'$.

Integrando (2.1)

$$x(t) = x_0 + \int_0^t \eta(t') dt', \quad (2.3)$$

se obtiene la posición del centro de masa para la partícula. La solución (2.3) representa un proceso estocástico: se pueden tener diferentes resultados para la posición de la partícula para una misma condición inicial x_0 , ya que $x(t)$ depende de $\eta(t)$ entre t_0 y t . Al ser $x(t)$ una cantidad aleatoria es prudente tomar su promedio, este se efectúa promediando sobre todas las diferentes realizaciones del ruido $\eta(t)$ que pudo haber sentido la partícula desde el inicio de su recorrido hasta el tiempo t :

$$\langle x(t) \rangle = x_0 + \int_0^t \langle \eta(t') \rangle dt'.$$

Por la primera propiedad en (2.2) el segundo término del lado derecho en la ecuación anterior es cero de donde se sigue que $\langle x(t) \rangle = x_0$. Por otro lado, cuando se calcula el desplazamiento cuadrático medio se obtiene

$$\begin{aligned} x(t) - x_0 &= \int_0^t \eta(t') dt' \Rightarrow (x(t) - x_0)^2 = \int_0^t \eta(t_1) dt_1 \int_0^t \eta(t_2) dt_2 \\ \langle (x(t) - x_0)^2 \rangle &= \int_0^t \int_0^t \langle \eta(t_1) \eta(t_2) \rangle dt_2 dt_1 = 2D \int_0^t \int_0^t \delta(t_1 - t_2) dt_2 dt_1 = 2D \int_0^t dt_1, \end{aligned}$$

ó $\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle = 2Dt$, que concuerda con la ecuación (1.6) del capítulo 1.

A diferencia del capítulo uno sección 1.3, donde se derivó la ecuación de difusión partiendo de tiempos y posiciones discretos, en esta sección proponemos derivar la misma ecuación pero considerando tiempos y posiciones continuos. Desarrollar la ecuación de difusión de esta forma nos ayudará a deducir una ecuación diferencial parcial que incluya el mecanismo de reinicio.

Consideremos un tiempo posterior $t + \Delta t$ con $0 < \Delta t \ll t$ tal que se deban tomar en cuenta todas las posibles contribuciones a esta densidad. La probabilidad para que en el intervalo $[t, t + \Delta t]$ la partícula avance una pequeña distancia Δx es

$$p(x, t + \Delta t) - p(x, t) = \int d(\Delta x) p(x - \Delta x, t) \phi(\Delta x) - \int d(\Delta x) p(x, t) \phi(\Delta x), \quad (2.4)$$

donde el primer término del lado derecho representa la probabilidad de que la partícula avance desde una posición $x - \Delta x$ hacia x y el segundo expresa la pérdida de probabilidad en la posición x debido

al movimiento de la partícula desde ahí. En esta ecuación $\phi(\Delta x)$ una densidad de probabilidad para que la partícula avance una distancia Δx en un intervalo Δt . Esta densidad tiene la propiedad de normalización $\int d(\Delta x) \phi(\Delta x) = 1$, por lo tanto el segundo término del lado derecho es cero si se suma con el segundo término del lado izquierdo. De aquí que la ecuación anterior se reduzca a

$$p(x, t + \Delta t) = \int d(\Delta x) p(x - \Delta x, t) \phi(\Delta x). \quad (2.5)$$

Al realizar las expansiones en serie de Taylor para $p(x, t + \Delta t)$ y $p(x - \Delta x, t)$ y ocupar que $\langle \Delta x \rangle = 0$ junto con $\langle \Delta x^2 \rangle = 2D\Delta t$, llegamos al resultado

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

La solución es ya conocida y derivada en la sección 1.4

$$p(x, t) = \sqrt{\frac{1}{4\pi Dt}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4Dt}}. \quad (2.6)$$

Recalamos que según (2.6) la probabilidad de encontrar la partícula en una posición x que no sea su posición inicial crece con el tiempo a tiempos cortos y luego decrece a tiempos largos. Una característica que es de esperarse del proceso de difusión libre: la partícula se dispersa hacia todas las regiones del espacio disponibles. Para tiempos muy largos la partícula se difunde sin restricción alguna reduciendo su probabilidad $p(x, t) \rightarrow 0$ para cualquier x , es decir la partícula no adopta ningún estado estacionario para $t \rightarrow \infty$, hecho que sí sucede cuando hay fronteras limitantes tal y como examinó en la sección 1.4.4. En este caso las dos paredes reflejantes mantienen a la partícula dentro del canal, incluso para tiempos $t \rightarrow \infty$ a la partícula le es imposible escapar. En este límite el resultado (1.37), predice un límite donde $p(x, t)$ toma un valor independiente del tiempo o en otras palabras, un estado estacionario. Pero, una pregunta interesante surge: *¿hay alguna forma de lograr un estado estacionario sin introducir fronteras o potenciales en el sistema en cuestión? Y la respuesta es sí, modificando la dinámica de la partícula introduciendo el mecanismo de reinicio estocástico.*

Este mecanismo altera de manera significativa la dinámica de la partícula, haciéndola reiniciar en algún sitio predeterminado cada cierto tiempo. Consideremos el proceso definido por:

$$x(t + dt) = \begin{cases} x_0 & \text{con probabilidad } rdt \\ x(t) + \eta(t) dt & \text{con probabilidad } 1 - rdt \end{cases}. \quad (2.7)$$

Donde r es un parámetro positivo y *constante*, y x_0 la posición de reinicio. Es decir, si al tiempo t la partícula estaba en la posición x , entonces al siguiente instante $t + dt$ la partícula tiene dos posibles opciones de evolución en su dinámica. Con probabilidad rdt puede regresar a su posición inicial x_0 (en este caso su posición de reinicio) y con probabilidad $1 - rdt$ evolucionar siguiendo una trayectoria aleatoria dada por $\eta(t)$ como en la difusión simple. r se podría interpretar como una frecuencia o tasa de reinicio tal que al hacerse 0 el problema se reduzca al de difusión libre.

Una pregunta importante cuya respuesta será útil en un futuro es: dada la dinámica en (2.7) y empezando desde $t = 0$ ¿cuál es la distribución de probabilidad para los intervalos de tiempo

entre dos reinicios? En respuesta a esta interrogante resulta conveniente discretizar el tiempo en pequeños intervalos Δt

$$t = N\Delta t.$$

La probabilidad para que a $t = 0 + \Delta t$ la partícula evolucione mediante $x(0) + \eta(\Delta t)\Delta t$ es $(1 - r\Delta t)$, luego la probabilidad para que evolucione con la misma dinámica en el siguiente intervalo Δt es $(1 - r\Delta t)(1 - r\Delta t)$ y así sucesivamente hasta N veces. De esta manera, la probabilidad de que la partícula no haya reiniciado hasta el tiempo t es

$$p_N = (1 - r\Delta t)(1 - r\Delta t) \dots (1 - r\Delta t) = (1 - r\Delta t)^N,$$

y al final la probabilidad para que al tiempo $t + \Delta t$ suceda el reinicio es

$$p = (1 - r\Delta t)^N r\Delta t.$$

Pero $N = t/\Delta t$, entonces

$$p = (1 - r\Delta t)^{\frac{t}{\Delta t}} r\Delta t. \quad (2.8)$$

En vista de la definición en términos de un límite de la función exponencial

$$e^x = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{x}{n}\right)^n,$$

la ecuación (2.8) se puede transformar tomando el límite $\Delta t \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} p &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} (1 - r\Delta t)^{\frac{t}{\Delta t}} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} r\Delta t = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - r\frac{t}{N}\right)^N \lim_{\Delta t \rightarrow 0} r\Delta t = e^{-rt} r dt \\ \therefore \lim_{\Delta t \rightarrow 0} p &= e^{-rt} r dt. \end{aligned}$$

Entonces la probabilidad para que no se dé el reinicio en el intervalo $[0, t]$ es

$$P_{nr} = e^{-rt} \quad (2.9)$$

mientras que aquella para que el reinicio suceda, en un intervalo $[t, t + dt]$ por primera vez desde $t = 0$ es:

$$P_r = re^{-rt} dt. \quad (2.10)$$

Uno debe observar que a diferencia de la difusión libre donde en promedio la distancia recorrida por la partícula va como $|x - x_0| \sim t^{1/2}$, en difusión con reinicio esto es diferente porque llegado el evento de reinicio, la partícula puede recorrer cualquier distancia $|x - x_0|$ hasta la posición de reinicio donde vuelve a comenzar su movimiento. Pero ¿cómo podemos cuantificar estos saltos?, ¿cómo estudiamos qué tanto, en promedio, la partícula se aleja antes del siguiente reinicio a x_0 ? Veamos en lo que sigue cómo es posible estudiar estas preguntas y también cómo es posible derivar la densidad de probabilidad asociada a este sistema con el mecanismo de reinicio incluido, denotada por $p_r(x, t)$.

El modo de derivar la correspondiente ecuación Fokker-Planck para $p_r(x, t)$ es muy similar al caso de difusión libre, sólo que en este caso hay cierta probabilidad de que la partícula evolucione

de acuerdo al mecanismo de reinicio. Es decir, en la expansión (2.4) se introducen las reglas de evolución (2.7), esto es

$$p_r(x, t + \Delta t) = (1 - r\Delta t) \int d(\Delta x) p_r(x - \Delta x, t) \phi(\Delta x) + r\Delta t \delta(x - x_0). \quad (2.11)$$

En comparación con (2.5), la última expresión sí toma en cuenta la probabilidad que tiene la partícula de evolucionar en siguiente intervalo Δt hacia la posición de reinicio x_0 . Es decir, el término $r\Delta t \delta(x - x_0)$ expresa la fuente de probabilidad que representa el punto de reinicio x_0 . Al hacer las correspondientes expansiones tal y como se hicieron en el caso de difusión libre se llega a una ecuación Fokker-Planck donde la propiedad de reinicio es incluida

$$\frac{\partial p_r(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p_r(x, t)}{\partial x^2} - r p_r(x, t) + r \delta(x - x_0). \quad (2.12)$$

Destaquemos que la última ecuación se reduce a (1.10) para difusión libre cuando se hace $r = 0$.

Ahora, investiguemos el estado estacionario de la ecuación (2.12). Esto es: $\partial p_r(x, t) / \partial t = 0$ ¹ tal que ahora la ecuación (2.12) se simplifica

$$D \frac{\partial^2 p_r(x|x_0)}{\partial x^2} - r p_r(x|x_0) = -r \delta(x - x_0). \quad (2.13)$$

Podemos resolver esta ecuación si tomamos en cuenta los sub-intervalos $-\infty < x < x_0$ y $x_0 < x < \infty$ donde el término fuente del lado derecho es idénticamente cero. Las respectivas soluciones (excluyendo aquellos términos donde la respectiva solución diverge para $x \rightarrow -\infty$ y $x \rightarrow \infty$) en dados intervalos son

$$p_r(x) = \begin{cases} A e^{\sqrt{\frac{r}{D}} x} & \text{con } x < x_0 \\ B e^{-\sqrt{\frac{r}{D}} x} & \text{con } x > x_0 \end{cases}. \quad (2.14)$$

Podemos calcular cuál es el valor de la constante B con base a la continuidad de la función $p_r(x|x_0)$ en $x = x_0$. Esto es $p_r(x_- = x_0) = p_r(x_+ = x_0)$ siendo $p_r(x_- = x_0)$ y $p_r(x_+ = x_0)$ la solución evaluada en x_0 en cada uno de los intervalos por separado. Esta condición proporciona la igualdad $A e^{\sqrt{\frac{r}{D}} x_0} = B e^{-\sqrt{\frac{r}{D}} x_0}$, de donde se concluye que $B = A e^{2\sqrt{\frac{r}{D}} x_0}$. Sustituyendo de vuelta en (2.14) tenemos

$$p_r(x|x_0) = \begin{cases} A e^{\alpha_0 x} & \text{con } x < x_0 \\ A e^{-\alpha_0(x-2x_0)} & \text{con } x > x_0 \end{cases}, \quad (2.15)$$

donde hemos definido $\alpha_0 = \sqrt{\frac{r}{D}}$. La constante A puede ser determinada usando la ecuación (2.13), esto es integrándola en un intervalo donde x_0 este contenida. Esto es

$$\begin{aligned} D \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} dx \frac{\partial^2 p_r(x|x_0)}{\partial x^2} - r \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} p_r(x|x_0) dx &= -r \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} \delta(x - x_0) dx \\ D \left[\frac{\partial p_r(x|x_0)}{\partial x} \right]_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} - r \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} p_r(x|x_0) dx &= -r \\ D \frac{\partial p_r(x > |x_0)}{\partial x} \Big|_{x=x_0+\varepsilon} - D \frac{\partial p_r(x < |x_0)}{\partial x} \Big|_{x=x_0-\varepsilon} - r \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} p_r(x|x_0) dx &= -r, \end{aligned}$$

¹En un estado estacionario la cantidad descrita será independiente del tiempo.

si tomamos el límite de $\varepsilon \rightarrow 0$ en la última ecuación obtenemos una ecuación simple para calcular la constante A

$$2DA\alpha_0 e^{\alpha_0 x_0} = r,$$

lo que proporciona el valor de la constante como $A = \frac{r e^{-\alpha_0 x_0}}{2D\alpha_0} = \frac{\alpha_0 e^{-\alpha_0 x_0}}{2}$, por lo tanto la ecuación (2.15) da como resultado

$$p_r(x|x_0) = \begin{cases} \frac{1}{2}\sqrt{\frac{r}{D}} e^{\alpha_0(x-x_0)} & \text{con } x < x_0 \\ \frac{1}{2}\sqrt{\frac{r}{D}} e^{-\alpha_0(x_0-x)} & \text{con } x > x_0 \end{cases},$$

o escrita de manera equivalente usando la definición de valor absoluto:

$$p(x|x_0) = \sqrt{\frac{r}{D}} \frac{e^{-\sqrt{r/D}|x-x_0|}}{2}. \quad (2.16)$$

Otra forma de obtener el mismo resultado que en (2.16) es usar el enfoque de las ecuaciones de renovación donde se define $p(x, t|x_0, x_r)$ como la densidad en x al tiempo t , dada una posición inicial x_0 y una posición de reinicio x_r . En el caso general, x_0 y x_r pueden ser diferentes. Por ejemplo, la ecuación “last renewed” toma en cuenta varias contribuciones, que se escriben de la siguiente manera[55]

$$p(x, t|x_0, x_r) = e^{-rt} G_d(x, t|x_0) + r \int_0^t d\tau e^{-r\tau} G_d(x, \tau|x_r). \quad (2.17)$$

El primer término del lado derecho representa la contribución a la densidad de probabilidad debido a trayectorias de la partícula que empiezan su posición inicial en x_0 y en las cuales no hay ningún reinicio hasta el tiempo t , siendo $G_d(x, t|x_0)$ el propagador para la difusión libre

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

y el factor e^{-rt} es la distribución P_{nr} en (2.9) indicando la probabilidad de que hasta el tiempo t no ocurra un evento de reinicio. El segundo término del lado derecho (2.17) es la contribución a la densidad de probabilidad debido a trayectorias con reinicio de la partícula, de ahí el factor r que multiplica a toda la integral. En el segundo término de (2.17) se toma en cuenta el tiempo de último reinicio y se integra sobre todas las posibles contribuciones a este. Se considera que entre el tiempo $t - \tau$ y t ($0 < \tau < t$) no hay reinicio, por lo que el factor $e^{-r\tau}$ es incluido junto con el correspondiente propagador $G_d(x, \tau|x_r)$ de difusión libre con x_r siendo la posición de reinicio. Finalmente, el factor $r d\tau$ es la probabilidad de tener un reinicio cerca del tiempo $t - \tau$.

El estado estacionario también se obtiene de (2.17) haciendo $t \rightarrow \infty$, el primer término del lado derecho tiende a cero y sólo resta el término del operador integral

$$\lim_{t \rightarrow \infty} p(x, t|x_0, x_r) = p(x|x_0, x_r) = r \int_0^\infty d\tau e^{-r\tau} G_d(x, \tau|x_r) = r \int_0^\infty d\tau e^{-r\tau} \sqrt{\frac{1}{4\pi D\tau}} e^{-\frac{(x-x_r)^2}{4D\tau}}. \quad (2.18)$$

La integral puede ser resuelta usando la identidad [55]

$$\int_0^\infty dt t^{\nu-1} e^{-\frac{\beta}{t}-\gamma t} = 2 \left(\frac{\beta}{\gamma} \right)^{\frac{\nu}{2}} K_\nu \left(2\sqrt{\beta\gamma} \right), \quad (2.19)$$

donde K_ν son las funciones de Bessel de segundo tipo y orden ν ; al comparar el resultado anterior con (2.18) es posible comprobar que en nuestro caso el orden es $\nu = 1/2$:

$$\int_0^\infty dt t^{-1/2} e^{-\frac{\beta}{t}-\gamma t} = 2 \left(\frac{\beta}{\gamma} \right)^{\frac{1}{4}} K_{1/2} \left(2\sqrt{\beta\gamma} \right). \quad (2.20)$$

Además se conoce que

$$K_{1/2} \left(2\sqrt{\beta\gamma} \right) = \left(\frac{\pi}{4\sqrt{\beta\gamma}} \right)^{1/2} e^{-2\sqrt{\beta\gamma}}. \quad (2.21)$$

Haciendo $\beta = (x - x_r)^2 / 4D$ y $\gamma = r$ en conjunto con (2.20) y (2.21), la integral (2.18) da como resultado

$$p(x|x_r) = \frac{r}{\sqrt{4\pi D}} \int_0^\infty d\tau \tau^{-1/2} e^{-\frac{(x-x_r)^2}{4D\tau}-r\tau} = \frac{r}{\sqrt{4\pi D}} \frac{2}{\sqrt{r}} \left(\frac{\pi}{4} \right)^{1/2} e^{-2\sqrt{r\frac{(x-x_r)^2}{4D}}}, \quad (2.22)$$

ó

$$p(x|x_r) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{r}{D}} e^{-|x-x_r|\sqrt{r/D}}. \quad (2.23)$$

Notar que a partir de que se toma $t \rightarrow \infty$, la contribución a la densidad de probabilidad se da principalmente debido a trayectorias con reinicio hacia x_0 . La ecuación (2.23) es una distribución de Laplace centrada en x_0 y, por tanto, debido a los reinicios aleatorios, la posición más probable de encontrar a la partícula es en $x = x_0$ y decae exponencialmente a partir de esta posición.

Para concluir, cabe recalcar que a partir de modificar la dinámica mediante las reglas en (2.7) se logra obtener un estado estacionario de no equilibrio (NESS por sus siglas en inglés, Non-Stationary Steady State) que surge debido a la fuente de probabilidad que hay en el punto de reinicio y a la pérdida de la misma en todos los puntos x diferentes de éste.

2.2. Tiempo promedio de captura con reinicio

En esta sección la principal interrogante que se abordará será: en una dinámica de difusión simple donde el mecanismo de reinicio es incluido, ¿el tiempo promedio de captura es finito? En atención a este asunto se considera una partícula en difusión libre con un blanco absorbente en $x = 0$ que sigue las reglas de evolución de reinicio al punto de partida descritas en (2.7). Al igual que en la sección anterior, se desea calcular la distribución $\mathcal{P}_r(t, x_0)$ para el tiempo promedio de captura y luego simplemente tomar el promedio de esta distribución.

El cálculo de $\mathcal{P}_r(t, x_0)$ es muy similar al método utilizado anteriormente, en lo concerniente a las ecuaciones de renovación. En este caso se ocupan las mismas ideas para la distribución $\mathcal{P}_r(t, x_0)$ que dieron lugar a la ecuación *last renewed* (2.17) con $x_r = x_0$; es decir

$$\mathcal{P}_r(t, x_0) = e^{-rt} \mathcal{P}(t, x_0) + r \int_0^t d\tau e^{-r\tau} \mathcal{P}(\tau, x_0) S_r(x_0, t - \tau), \quad (2.24)$$

donde el primer término del lado derecho representa trayectorias en las que no sucede reinicio durante el intervalo $[0, t]$, de ahí el factor exponencial, con $\mathcal{P}(t, x_0)$ dado por (1.48) en el caso de difusión libre. Al igual que en (2.17), el segundo término de (2.24), representa trayectorias que sí tienen al menos un reinicio hasta el tiempo $t - \tau$. A este tiempo se le llama de último reinicio. Durante el intervalo $d\tau$ pueden ocurrir dos eventos distintos a según (2.7). Con probabilidad $r d\tau$ la partícula puede reiniciar hasta x_0 . Por otra parte, con probabilidad $e^{-r\tau}$ la partícula puede seguir con difusión simple durante un tiempo τ , de ahí el factor $e^{-r\tau} \mathcal{P}(\tau, x_0)$. A diferencia de (2.17), en el integrando de (2.24) hay un factor extra $S_r(x_0, t - \tau)$ que corresponde a la probabilidad de supervivencia que se tiene hasta el tiempo $t - \tau$ en el que hay reinicio.

La relación general que existe entre el tiempo promedio de primer arribo y la probabilidad de supervivencia puede ser encontrada si aplicamos la transformada de Laplace a la definición del tiempo promedio de captura. Si consideramos la definición $\langle T_f \rangle$ en conjunto con la ecuación (1.46) se tiene

$$\langle T_r \rangle = \int_0^\infty dt \mathcal{P}_r(x_0, t) t = - \int_0^\infty dt \frac{\partial S_r(x_0, t)}{\partial t} t, \quad (2.25)$$

y al efectuar una integración por partes se llega a la ecuación

$$\langle T_r \rangle = [-t S_r(x_0, t)]_0^\infty + \int_0^\infty S_r(x_0, t) dt.$$

Podemos hacer cero el primer término del lado derecho de la última ecuación si consideramos que $S_r(x_0, t)$ decrece más rápido que el factor $1/t$ para $t \rightarrow \infty$. Por lo tanto, lo que nos queda es

$$\langle T_r \rangle = \int_0^\infty S_r(x_0, t) dt = q_r(s=0, x_0), \quad (2.26)$$

donde hemos definido la transformada de Laplace de S_r como

$$q_r(s, x_0) = \int_0^\infty dt e^{-st} S_r(x_0, t).$$

Notemos lo sencillo que resulta calcular el tiempo promedio de captura con la ecuación (2.26). Simplemente hacemos $s = 0$ en $q_r(s, x_0)$. Esta es la utilidad que la transformada de Laplace tiene en los procesos de primer arribo. Por esta razón resulta sencillo tomar la transformada de Laplace de (2.24) donde $\mathcal{P}(t, x_0)$ está dado por (1.48) y luego hacer $s = 0$ y así obtener el promedio para esa densidad de probabilidad. Realizando este procedimiento paso a paso se tiene

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_r(t, x_0) &= - \frac{\partial S_r(x_0, t)}{\partial t} = e^{-rt} \mathcal{P}(t, x_0) + r \int_0^t d\tau e^{-r\tau} \mathcal{P}(\tau, x_0) S_r(x_0, t - \tau) \\ &= \frac{x_0}{\sqrt{4\pi D}} \frac{e^{-x_0^2/4Dt} e^{-rt}}{t^{3/2}} + \frac{r x_0}{\sqrt{4\pi D}} \int_0^t d\tau \frac{e^{-x_0^2/4Dt} e^{-r\tau}}{t^{3/2}} S_r(x_0, t - \tau) \\ &= A(x_0, t) e^{-rt} + r \int_0^t d\tau e^{-r\tau} A(x_0, \tau) S_r(x_0, t - \tau) \end{aligned}$$

o

$$- \frac{\partial S_r(x_0, t)}{\partial t} = A(x_0, t) + r \int_0^t d\tau A(x_0, \tau) S_r(x_0, t - \tau) \quad (2.27)$$

donde se ha definido a la función $A(x_0, t)$ como

$$A(x_0, t) = \frac{x_0}{\sqrt{4\pi D}} \frac{e^{-x_0^2/4Dt}}{t^{3/2}}.$$

Al tomar la transformada de Laplace en (2.27) se tiene

$$-\int_0^\infty dt \frac{\partial S_r(x_0, t)}{\partial t} e^{-st} = \int_0^\infty dt A(x_0, t) e^{-t(r+s)} + r \int_0^\infty dt e^{-st} \int_0^t d\tau e^{-r\tau} A(x_0, \tau) S_r(x_0, t - \tau), \quad (2.28)$$

e integrando por partes el lado izquierdo

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dt \frac{\partial S_r(x_0, t)}{\partial t} e^{-st} &= \left[e^{-st} S_r(x_0, t) \right]_0^\infty + s \int_0^\infty dt S_r(x_0, t) e^{-st} \\ &= -1 + s q_r(s, x_0) \\ \therefore \int_0^\infty dt \frac{\partial S_r(x_0, t)}{\partial t} e^{-st} &= -1 + s q_r(s, x_0) \end{aligned}$$

donde se ha tomado que $S(x_0, t=0) = 1$, ya que por suposición la partícula empieza su recorrido en $x_0 > 0$. Sustituyendo este resultado en (2.28)

$$1 - s q_r(s, x_0) = \int_0^\infty dt A(x_0, t) e^{-t(r+s)} + r \int_0^\infty dt e^{-st} \int_0^t d\tau e^{-r\tau} A(x_0, \tau) S_r(x_0, t - \tau),$$

ahora, la integral del lado derecho de la última relación simplemente es el teorema de convolución de Laplace (por ejemplo ver ecuación 20.186 de [48]), de aquí que (2.28) se reescriba como

$$1 - s q_r(s, x_0) = \tilde{A}(r+s, x_0) + r \tilde{A}(r+s, x_0) q_r(s, x_0), \quad (2.29)$$

con

$$\tilde{A}(r+s, x_0) = \int_0^\infty dt A(x_0, t) e^{-t(r+s)} = \frac{x_0}{\sqrt{4\pi D}} \int_0^\infty dt \frac{e^{-x_0^2/4Dt - t(r+s)}}{t^{3/2}}. \quad (2.30)$$

De acuerdo a 5.30 de [50] la transformada de (2.30) es simplemente aquella que se encontró en (1.47)

$$\tilde{A}(r+s, x_0) = e^{-x_0 \sqrt{\frac{(r+s)}{D}}}. \quad (2.31)$$

Finalmente, resolviendo la ecuación (2.29) para $q_r(s, x_0)$

$$q_r(s, x_0) = \frac{1 - \tilde{A}(r+s, x_0)}{s + r \tilde{A}(r+s, x_0)}, \quad (2.32)$$

y sustituyendo (2.31) es como tenemos el resultado final:

$$q_r(s, x_0) = \frac{1 - e^{-x_0 \sqrt{\frac{(r+s)}{D}}}}{s + r e^{-x_0 \sqrt{\frac{(r+s)}{D}}}}. \quad (2.33)$$

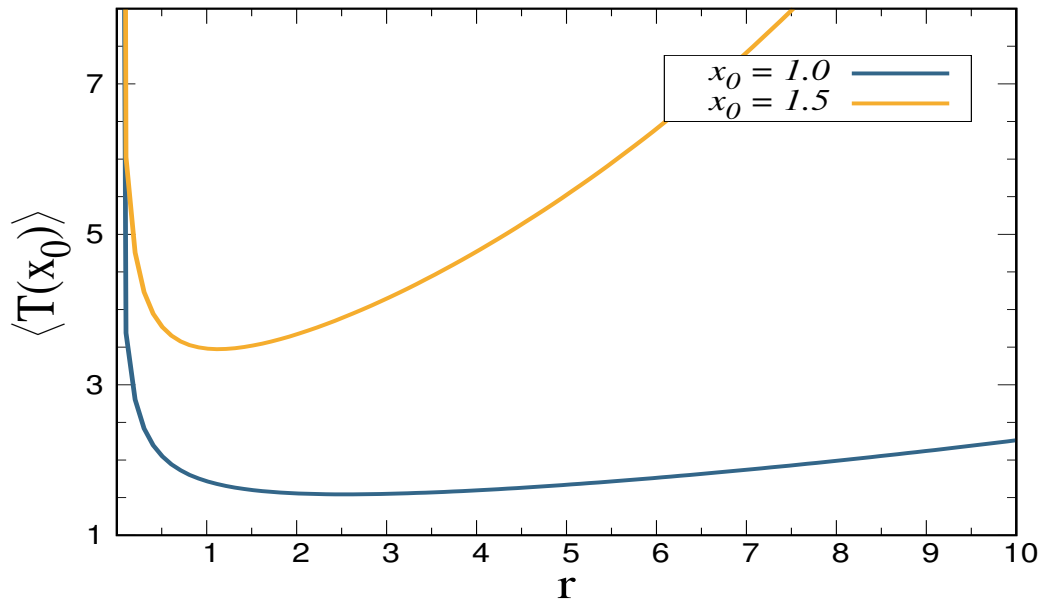


Figura 2.1: Como consecuencia del mecanismo de reinicio la partícula, a diferencia de pura difusión libre, tiene un tiempo promedio de llegada finito y además este tiene un mínimo global. En esta gráfica $D = 1$.

Usando la relación (2.26), se hace $s = 0$ en la última ecuación para encontrar el tiempo promedio de primer arribo

$$\langle T_r \rangle = q_r(s = 0, x_0) = \frac{1 - e^{-x_0 \sqrt{\frac{r}{D}}}}{r e^{-x_0 \sqrt{\frac{r}{D}}}} = \frac{e^{x_0 \sqrt{\frac{r}{D}}} - 1}{r}, \quad (2.34)$$

el cual a diferencia del caso en difusión libre es finito para una tasa de reinicio finita r . El caso de difusión libre se obtiene fácilmente de (2.34) haciendo $r \rightarrow 0$, es decir, $\langle T_r \rangle$ diverge en este límite (como ya se había encontrado en la sección pasada). Entonces, una conclusión obvia pero necesaria de notar es que, en promedio, el primer tiempo de arribo disminuye cuando se introduce la característica de reinicio al sistema; este mecanismo no permite la incursión por parte del buscador a trayectorias que se alejen mucho de su punto de reinicio haciendo que su llegada al blanco sea viable. En la Fig. 2.1 se ha ilustrado la relación (2.34) para $\langle T_r \rangle$ en función de r . Claramente esta cantidad de primer arribo diverge exponencialmente cuando la tasa de reinicio tiende al infinito y además aumenta de manera significativa si la posición de reinicio se aleja del blanco absorbente. Sin embargo, quizás el hecho más sobresaliente, es que la inclusión del mecanismo de reinicio a la dinámica de la partícula tiene como efecto producir un mínimo global en $\langle T_r \rangle$. Esto significa la existencia de una tasa de reinicio óptima r^* , parámetro que puede ser calculado fácilmente si tenemos en cuenta que una vez el tiempo promedio de primer arribo sea mínimo, su primera

derivada con respecto a r , evaluada en r^* debe ser cero:

$$\begin{aligned} \left[\frac{d \langle T_r(r) \rangle}{dr} \right]_{r=r^*} &= 0, \\ \therefore -\frac{1}{r^2} \left(e^{x_0 \sqrt{\frac{r}{D}}} - 1 \right) + \frac{x_0 e^{x_0 \sqrt{\frac{r}{D}}}}{2r^{3/2} \sqrt{D}} &= 0 \\ \Rightarrow 1 - e^{x_0 \sqrt{\frac{r}{D}}} + \frac{x_0 \sqrt{r} e^{x_0 \sqrt{\frac{r}{D}}}}{2\sqrt{D}} &= 0, \end{aligned}$$

simplificando la última expresión se encuentra una ecuación trascendental a resolver para r

$$e^{-y^*} + \frac{y^*}{2} = 1, \quad (2.35)$$

donde se ha definido $y = x_0 \sqrt{\frac{r}{D}}$. Numéricamente, la solución asociada a la ecuación (2.35) es $y^* = x_0 \sqrt{\frac{r^*}{D}} = 1.5936242 \approx 1.6 = 8/5$, y por tanto el valor extremo que minimiza a $\langle T_r(r) \rangle$ es

$$r^* \approx \left(\frac{8}{5x_0} \right)^2 D.$$

Notamos cómo este valor es explícitamente dependiente de la posición donde inicie la partícula así como también de la constante de difusión. La dependencia funcional de la tasa de reinicio óptima depende inversamente del cuadrado de la distancia desde donde reinicie la partícula. Por tanto, es natural que para encontrar el blanco en $x = 0$ uno tenga que reiniciar la búsqueda muchas veces cerca de éste y muy pocas veces lejos de él.

2.2.1. Deducción de la ecuación Fokker-Planck hacia atrás con reinicio

En términos matemáticos formales, la probabilidad de supervivencia se define como en (1.54). Sin embargo, ahora se incluirá la densidad de probabilidad con reinicio $p_r(x, t|x_0, x_r)$ para denotar a las cantidades con este mecanismo incluido

$$S_r(t|x_0) = \int_R dx p_r(x, t|x_0, x_r) \quad (2.36)$$

y R el intervalo espacial donde la partícula puede existir.

De aquí en adelante será útil trabajar con la distribución en (2.36), por lo que es necesario derivar una ecuación hacia atrás (Backwards Fokker-Planck equation en inglés) donde la característica de reinicio sea incluida y además x_0, x_r sean las posiciones inicial y de reinicio respectivamente. Por lo tanto, ¿cuál es la densidad de probabilidad de la partícula al tiempo $t + \Delta t$, en el punto x , si empezó en x_0 y continuamente reinicia a x_r ? La respuesta radica en las reglas de evolución (2.7). La densidad $p(x, t + \Delta t|x_0, x_r)$ tiene dos contribuciones. Para visualizarlas, fragmentemos el intervalo $[0, t + \Delta t]$ en dos partes. Uno que tenga longitud Δt , i.e. $[0, \Delta t]$. Y otro de longitud t , esto es $[\Delta t, t + \Delta t]$, tal y como se ilustra en la figura 2.2. Durante el intervalo $[0, \Delta t]$, y con

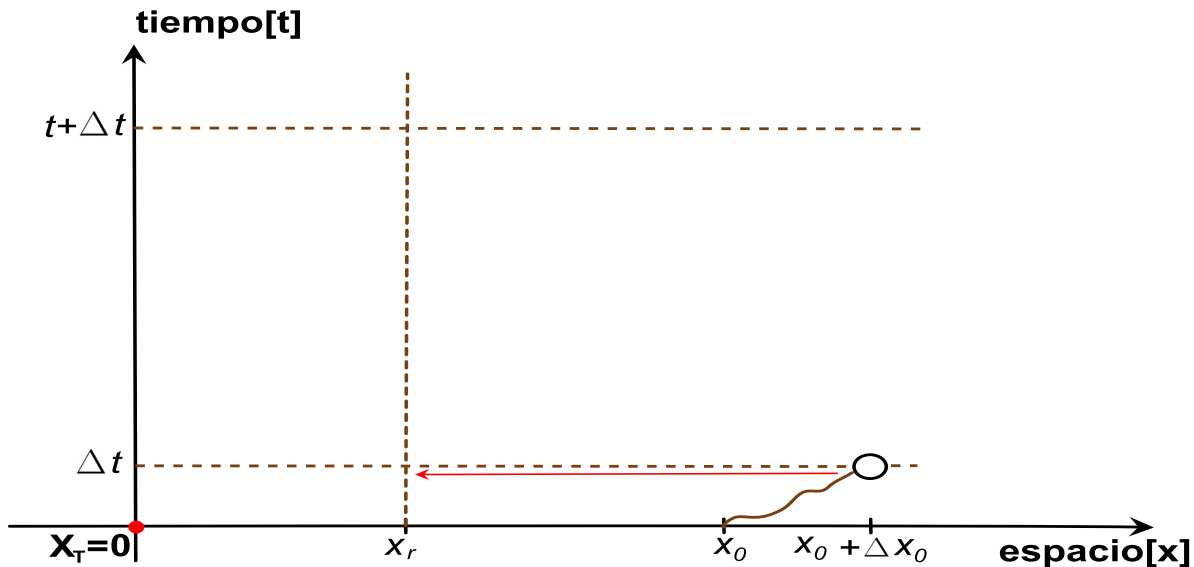


Figura 2.2: En el intervalo $[0, \Delta t]$, la partícula tiene dos opciones: con probabilidad $r\Delta t$ reiniciar a la posición x_r , señalado por la flecha roja. O con probabilidad $1 - r\Delta t$ llegar a la posición $x_0 + \Delta x_0$, señalado por el espacio encerrado por el círculo.

probabilidad $1 - r\Delta t$, la partícula puede seguir la dinámica de difusión simple y llegar hasta una posición $x_0 + \Delta x_0$. Como la difusión simple es un proceso sin memoria ó markoviano, la posición $x_0 + \Delta x_0$ se puede tomar como una nueva posición inicial. En otras palabras, si este evento tuviera lugar, la partícula llegaría a $x_0 + \Delta x_0$ en el intervalo Δt (es decir, ocuparía el espacio encerrado por el círculo en la figura 2.2) y el proceso de difusión con reinicio empezaría de nuevo durante un tiempo t . Por otra parte, en ese mismo intervalo $[0, \Delta t]$ y con probabilidad $r\Delta t$, la partícula puede reiniciar a x_r (señalado por la flecha roja en la figura 2.2). Es decir, la partícula puede llegar hasta el punto x al tiempo $t + \Delta t$ debido a que durante el primer intervalo $[0, \Delta t]$ reinició a x_r y siguió, mediante una dinámica de difusión con reinicio, durante un tiempo t :

$$p_r(x, t + \Delta t | x_0, x_r) = (1 - r\Delta t) \int d(\Delta x_0) p_r(x, t | x_0 + \Delta x_0, x_r) \phi_{\Delta t}(\Delta x_0) + r\Delta t p_r(x, t | x_r). \quad (2.37)$$

Considerando que $\Delta t \ll t$ podemos expandir $p_r(x, t | x_0 - \Delta x_0, x_r)$ en serie de Taylor

$$p_r(x, t | x_0 + \Delta x_0, x_r) = p_r(x, t | x_0, x_r) + \Delta x_0 \frac{\partial p_r(x, t | x_0, x_r)}{\partial x_0} + \frac{\Delta x_0^2}{2} \frac{\partial^2 p_r(x, t | x_0, x_r)}{\partial x_0^2} + O(\Delta x_0^3)$$

$$p_r(x, t + \Delta t | x_0, x_r) = p_r(x, t | x_0, x_r) + \Delta t \frac{\partial p_r(x, t | x_0, x_r)}{\partial t} + O(\Delta t^2)$$

y sustituir en (2.37) obtenemos (despreciando $O(\Delta t^2)$ y $O(\Delta x_0^3)$), se tiene

$$p_r + \Delta t \frac{\partial p_r}{\partial t} = \int d(\Delta x_0) \left[p_r(x, t|x_0, x_r) + \Delta x_0 \frac{\partial p_r(x, t|x_0, x_r)}{\partial x_0} + \frac{\Delta x_0^2}{2} \frac{\partial^2 p_r(x, t|x_0, x_r)}{\partial x_0^2} \right] \phi_{\Delta t}(\Delta x_0) \\ - r \Delta t \int d(\Delta x_0) \left[p_r + \Delta x_0 \frac{\partial p_r}{\partial x_0} + \frac{\Delta x_0^2}{2} \frac{\partial^2 p_r}{\partial x_0^2} \right] \phi_{\Delta t}(\Delta x_0) + r \Delta t p_r(x, t|x_r),$$

o escrito en una forma más simplificada

$$\Delta t \frac{\partial p_r}{\partial t} = \int d(\Delta x_0) \left[\Delta x_0 \frac{\partial p_r(x, t|x_0, x_r)}{\partial x_0} + \frac{\Delta x_0^2}{2} \frac{\partial^2 p_r(x, t|x_0, x_r)}{\partial x_0^2} \right] \phi_{\Delta t}(\Delta x_0) \\ - r \Delta t \int d(\Delta x_0) \left[p_r + \Delta x_0 \frac{\partial p_r}{\partial x_0} + \frac{\Delta x_0^2}{2} \frac{\partial^2 p_r}{\partial x_0^2} \right] \phi_{\Delta t}(\Delta x_0) + r \Delta t p_r(x, t|x_r). \quad (2.38)$$

La ecuación (2.38) puede ser reducida si consideramos que la distribución de incrementos Δx_0 es una simétrica tal que su primer y segundo momento esten dados por $\langle \Delta x_0 \rangle = 0$ y $\langle \Delta x_0^2 \rangle = 2D\Delta t$, respectivamente:

$$\Delta t \frac{\partial p_r(x, t|x_0, x_r)}{\partial t} = D\Delta t \frac{\partial^2 p_r(x, t|x_0, x_r)}{\partial x_0^2} - Dr\Delta t^2 \frac{\partial^2 p_r(x, t|x_0, x_r)}{\partial x_0^2} + r\Delta t p_r(x, t|x_r) - r\Delta t p_r \\ \approx D\Delta t \frac{\partial^2 p_r(x, t|x_0, x_r)}{\partial x_0^2} + r\Delta t p_r(x, t|x_r) - r\Delta t p_r(x, t|x_0, x_r).$$

De aquí que la ecuación Fokker-Planck hacia atrás para la densidad de probabilidad sea

$$\frac{\partial p_r(x, t|x_0, x_r)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p_r(x, t|x_0, x_r)}{\partial x_0^2} + r p_r(x, t|x_r) - r p_r(x, t|x_0, x_r). \quad (2.39)$$

Esta ecuación nos será de mucha utilidad en el capítulo 3 donde se resolverá a cabalidad usando las condiciones de frontera adecuadas al sistema en cuestión. Mientras tanto, consideramos importante mostrar que la ecuación (2.33) también puede ser calculada mediante las ecuaciones de renovación. Método que es ampliamente usado durante el capítulo 4.

2.2.2. Probabilidad de supervivencia mediante las ecuaciones de renovación

Ahora se considera el mismo sistema que en la sección 2.2 con blanco absorbente en $x = 0$ y posición de reinicio $x_r = x_0$. Se busca llegar al mismo resultado que en (2.34) usando las ecuaciones de renovación aplicadas a la probabilidad de supervivencia. La ecuación de último reinicio en este caso para $S_r(x|x_0)$ es similar a aquella en (2.24) por seguir los mismos argumentos en su estructura [7, 55]:

$$S_r(t|x_0) = e^{-rt} S_0(t|x_0) + r \int_0^t d\tau e^{-r\tau} S_r(t-\tau|x_0) S_0(\tau|x_0), \quad (2.40)$$

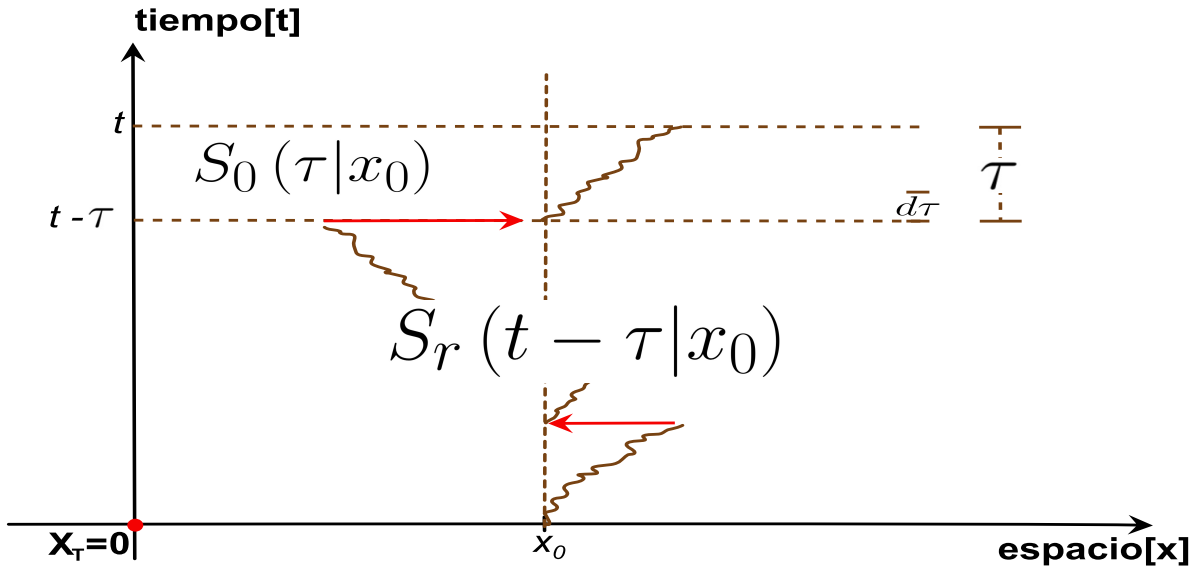


Figura 2.3: Este diagrama ilustra el segundo término de la ecuación (2.40). Si la partícula sobrevivió hasta el tiempo $t - \tau$, entonces la probabilidad de supervivencia $S_r(t - \tau | x_0)$ tiene que ser incluida.

donde $S_0(t|x_0)$ es la probabilidad de supervivencia para difusión libre sin reinicio que está asociada al intervalo donde puede existir la partícula, que en nuestro caso sería aquel dado por $[0, \infty)$. El primer término del lado derecho expresa la probabilidad de supervivencia debido a trayectorias en las que no hay reinicio hasta el tiempo t , de ahí el factor e^{-rt} . El segundo término toma en cuenta la posibilidad de múltiples reinicios por parte de la partícula hacia $x_r = x_0$ al tiempo $t - \tau$, el tiempo cuando sucedió el último reinicio, ver figura 2.3. Si la partícula sobrevivió hasta el tiempo $t - \tau$ con múltiples reinicios, entonces la probabilidad de supervivencia $S_r(t - \tau | x_0)$ tiene que ser incluida. Ahora, durante el intervalo $d\tau$ pueden ocurrir dos cosas: con probabilidad $rd\tau$ la partícula reinicia a x_0 . Si este no es el caso, la partícula evoluciona durante el intervalo τ de acuerdo a la dinámica de difusión simple codificada en $S_0(\tau|x_0)$, la probabilidad de que no exista reinicio durante τ es $e^{-r\tau}$. Por ser eventos independientes todas estas probabilidades se multiplican. Por ende, se explica la presencia del segundo término en (2.40).

Tomando la transformada de Laplace en (2.40) y aplicando el correspondiente teorema de convolución se obtiene:

$$q_r(t|x_0) = q_0(r + s|x_0) + rq_r(s|x_0)q(s + r|x_0).$$

Resolviendo para $q_r(t|x_0)$:

$$q_r(t|x_0) = \frac{q_0(r + s|x_0)}{1 - rq_0(r + s|x_0)}. \quad (2.41)$$

Pero ya se había calculado la cantidad $q_0(s|x_0)$ anteriormente en la ecuación (1.47); por lo tanto

$q_0(r+s|x_0) = \frac{1}{s+r} \left(1 - e^{-\sqrt{\frac{r+s}{D}}x_0}\right)$ se sustituye en (2.41)

$$q_r(t|x_0) = \frac{1 - e^{-\sqrt{\frac{r+s}{D}}x_0}}{s+r} \left[\frac{1}{1 - \frac{r}{r+s} \left(1 - e^{-\sqrt{\frac{r+s}{D}}x_0}\right)} \right] = \frac{1 - e^{-\sqrt{\frac{r+s}{D}}x_0}}{s + r e^{-\sqrt{\frac{r+s}{D}}x_0}}. \quad (2.42)$$

Éste es el mismo resultado que se obtuvo en la sección 2.2 para la transformada de Laplace en la probabilidad de supervivencia. En (2.42) haciendo $s = 0$ se estima el tiempo promedio de primer arribo, en este caso se llega exactamente a la misma expresión que en (2.34).

Difusión con reinicio cuando la posición inicial y de reinicio son diferentes

3.1. Formalismo de Fokker-Planck en el sistema de una pared absorbente

En este capítulo se estudian las consecuencias asociadas de tomar $x_r \neq x_0$. Como veremos en un momento, tener esta simple consideración puede generar un comportamiento muy interesante en el tiempo promedio de primer arribo. La consideración de una posición inicial que es diferente de donde reinicia la partícula implica incorporar un parámetro adicional en el tiempo promedio de captura, es decir, de la posición inicial. Esto significa que el proceso de primer arribo lleva codificada la dinámica descrita en (2.7).

La motivación de estudiar la generalización descrita en el párrafo anterior es amplia. Por ejemplo, podemos intentar predecir algunas características del movimiento de un animal que fué liberado a la vida silvestre en alguna posición x_0 y éste ha hecho un refugio en una posición a la que siempre regresa en x_r , o incluso en el caso tan habitual de la pérdida de un objeto que es necesario encontrarlo; la búsqueda podría empezar en la cocina y terminar por reiniciar insesantemente la búsqueda en la sala, donde sabemos que es más probable encontrarlo porque ahí fue la última vez que lo vimos. En cualquier caso, existe motivación por investigar el comportamiento del tiempo promedio de captura cuando éste depende de un parámetro adicional.

Debemos mencionar que no es la primera vez que se obtienen resultados con la premisa $x_0 \neq x_r$. Xavier et. al. en su artículo [56] considera esta ligera variación al problema de difusión Browniana con renicio estocástico limitado por dos fronteras. De acuerdo a ellos, si uno toma esta condición ($x_0 \neq x_r$) en cuenta, entonces el proceso de primer arribo muestra interesantes características poco triviales. Más aún, recientemente Pal y Prasad en su artículo [57] demuestran, para un sistema

unidimensional con dos paredes absorbentes, que existe una zona dentro de estas dos fronteras donde el reinicio estocástico ayuda a completar el proceso de primer arribo para alguna tasa de reinicio óptima $r^* > 0$, esto sin embargo para $x_0 = x_r$. El caso $x_0 \neq x_r$ es investigado en la sección 3.3 de este capítulo.

Sin embargo, antes de proceder directamente al caso de dos paredes absorbentes, primero empecemos obteniendo la ecuación de Fokker-Planck hacia atrás para la probabilidad de supervivencia en el caso de una sola. Esto es integrando con respecto a x en el intervalo $[0, \infty)$ a la ecuación (2.39)

$$\frac{\partial S_r(t|x_0, x_r)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 S_r(t|x_0, x_r)}{\partial x_0^2} + r S_r(t|x_r) - r S_r(t|x_0, x_r) \quad (3.1)$$

con $S_r(t|x_0, x_r) = \int_0^\infty dx p(x, t|x_0, x_r)$. Por comodidad establecemos el blanco absorbente en $x = 0$, tal que $S_r(t|x_0 = 0, x_r) = 0$ y la probabilidad de supervivencia al tiempo $t = 0$ es $S_r(t = 0|x_0, x_r) = 1$ si $x_0 \neq 0$. Ver [Fig. 3.1]. Notar que el término con $S_r(t|x_r)$ no depende de x_0 , esta cantidad sólo es la probabilidad de supervivencia cuando la posición inicial coincide con la posición de reinicio x_r . Tomemos la transformada de Laplace en (3.1)

$$\int_0^\infty dt e^{-st} \frac{\partial S_r(t|x_0, x_r)}{\partial t} = -1 + s q_r(s|x_0, x_r) = D \frac{\partial^2 q_r(s|x_0, x_r)}{\partial x_0^2} + r q_r(s|x_r) - r q_r(s|x_0, x_r),$$

con

$$q_r(s|x_0, x_r) = \int_0^\infty dt e^{-st} S_r(t|x_0, x_r), \quad (3.2)$$

la transformada de Laplace para la probabilidad de supervivencia con reinicio. La ecuación

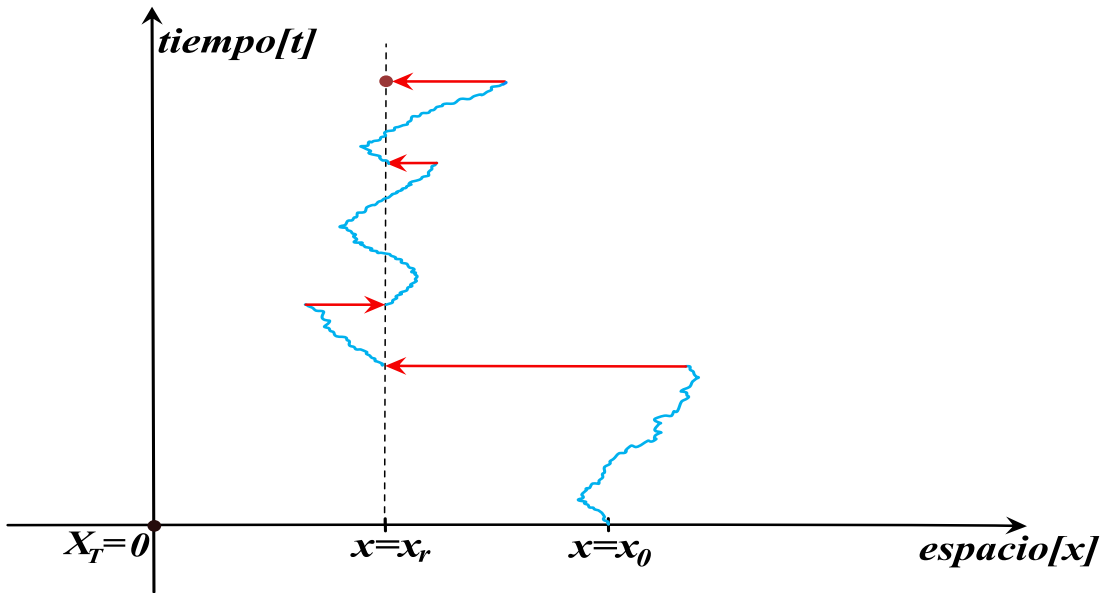


Figura 3.1: Partícula en difusión Browniana con reinicio y blanco absorbente en $x_T = 0$. La posición inicial x_0 y de reinicio x_r son diferentes

resultante se puede reescribir como

$$D \frac{\partial^2 q_r(s|x_0, x_r)}{\partial x_0^2} - (r+s) q_r(s|x_0, x_r) = -1 - r q_r(s|x_r). \quad (3.3)$$

y condición de frontera $q_r(s|x_0 = 0, x_r) = 0$. En (3.3), consideramos a $q_r(s|x_r)$ como una constante independiente de x_0 , que se determinará de manera auto-consistente.

La ecuación diferencial homogénea asociada es

$$\frac{\partial^2 q_r(s|x_0, x_r)}{\partial x_0^2} - \alpha^2 q_r(s|x_0, x_r) = 0 \quad \text{con} \quad \alpha^2 = \frac{r+s}{D}$$

con solución general conocida

$$q_r(s|x_0, x_r) = A e^{\alpha x_0} + B e^{-\alpha x_0}.$$

A partir de ahora consideremos $x_0 > 0$, entonces $q_r(s|x_0, x_r)$ no puede diverger en el límite $x_0 \rightarrow \infty$, por tanto $A = 0$. De aquí que la solución general a la homogénea sea

$$q_r(s|x_0, x_r) = B e^{-\alpha x_0}. \quad (3.4)$$

Ahora propongamos que la solución general a la ecuación no homogénea es de la forma

$$q_r(s|x_0, x_r) = B e^{-\alpha x_0} + C, \quad (3.5)$$

donde C es una constante en función de x_0 . Al sustituir esta solución en (3.3) obtenemos lo siguiente

$$\alpha^2 B e^{-\alpha x_0} - \alpha^2 (B e^{-\alpha x_0} + C) = -\frac{1}{D} - \frac{r}{D} (B e^{-\alpha x_r} + C)$$

donde se ha obtenido $q_r(s|x_r)$ sustituyendo x_0 por x_r en (3.5), simplificando la ecuación anterior podemos concluir que $C = \frac{1}{s} (1 + r B e^{-\alpha x_r})$. Sustituyendo C en (3.5), da como resultado

$$q_r(s|x_0, x_r) = B e^{-\alpha x_0} + \frac{1}{s} (1 + r B e^{-\alpha x_r}). \quad (3.6)$$

Ahora determinemos la constante B usando la condición de frontera $q_r(s|x_0 = 0, x_r) = 0$:

$$\begin{aligned} q_r(s|x_0 = 0, x_r) &= 0 = B + \frac{1}{s} (1 + r B e^{-\alpha x_r}) \\ -\frac{1}{s} &= B \left(1 + \frac{r}{s} e^{-\alpha x_r}\right) = B \left(\frac{s + r e^{-\alpha x_r}}{s}\right) \\ \therefore B &= -\frac{1}{s} \left(\frac{s}{s + r e^{-\alpha x_r}}\right) = -\frac{1}{s + r e^{-\alpha x_r}}. \end{aligned}$$

Entonces la solución general es

$$q_r(s|x_0, x_r) = -\frac{e^{-\alpha x_0}}{s + r e^{-\alpha x_r}} + \frac{1}{s} \left(1 - \frac{r e^{-\alpha x_r}}{s + r e^{-\alpha x_r}}\right), \quad (3.7)$$

simplificaciones algebraicas posteriores dan como resultado

$$q_r(s|x_0, x_r) = \frac{1 - e^{-\alpha x_0}}{s + r e^{-\alpha x_r}}$$

donde recordemos que $\alpha = \sqrt{\frac{s+r}{D}}$; ahora comprobemos que esta solución satisfaga los resultados obtenidos anteriormente, es decir el caso difusión libre de reinicio ($r = 0$) y el caso para cuando la posición inicial es igual a la posición de reinicio ($x_0 = x_r$):

i) Caso $r = 0$, la expresión (3.7) se reduce a

$$\begin{aligned} q_0(s|x_0, x_r) &= -\frac{e^{-\alpha_0 x_0}}{s} + \frac{1}{s} \\ \therefore q_0(s|x_0, x_r) &= \frac{1}{s} (1 - e^{-\alpha_0 x_0}) \quad \text{con} \quad \alpha_0 = \sqrt{\frac{s}{D}} \end{aligned}$$

resultado que efectivamente concuerda con aquel en (1.47).

ii) Caso $x_0 = x_r$, la expresión (3.7) se reduce a

$$q_r(s|x_0) = \frac{e^{\alpha x_0} - 1}{r + s e^{\alpha x_0}},$$

resultado que corrobora aquel en (2.42).

3.2. Formalismo de ecuaciones de Renovación

Podemos rederivar estos resultados usando las ecuaciones de renovación en el caso $x_0 \neq x_r$. La ecuación de último reinicio es muy similar a aquella en (2.40)

$$S_r(t|x_0, x_r) = e^{-rt} S_0(t, x_0) + r \int_0^t d\tau e^{-r\tau} S_0(\tau|x_r) S_r(t - \tau|x_0), \quad (3.8)$$

donde $S_0(t, x_0)$ está dada por la transformada inversa de Laplace en la ecuación (1.47), es decir $S_0(t, x_0) = \text{erf}\left(\frac{x_0}{\sqrt{4Dt}}\right)$, donde $\text{erf}(x)$ es la función error.

Por completitud describamos el significado de cada uno de los términos en (3.8); el segundo término del lado derecho describe posibles trayectorias seguidas por la partícula desde su posición inicial hasta el último reinicio a la posición x_r que ocurre al tiempo $t - \tau$. En el intervalo $\Delta\tau = \tau$ la partícula sufre difusión libre, y sobrevive con probabilidad $S_0(\tau|x_r)$. El factor $r d\tau e^{-r\tau}$ indica la probabilidad con la que se puede dar el último reinicio entre $t - \tau - d\tau$ y $t - \tau$. La probabilidad de que la partícula no haya sido absorbida entre el tiempo 0 y $t - \tau$ partiendo desde x_0 , es $S_r(t - \tau, x_0)$. Finalmente, el primer término del lado derecho es la probabilidad de supervivencia de la partícula libre, cuando no hay ningún reinicio en el intervalo de tiempo $[0, t]$, lo cual ocurre con probabilidad e^{-rt} .

Ahora se toma la transformada de Laplace en (3.8)

$$\int_0^\infty dt e^{-st} S_r(t|x_0, x_r) = \int_0^\infty dt e^{-t(r+s)} S_0(t, x_0) + r \int_0^\infty dt e^{-st} \int_0^t d\tau e^{-r\tau} S_0(\tau|x_r) S_r(t - \tau|x_0, x_r), \quad (3.9)$$

Con ayuda de la transformada de Laplace definida en (3.2) y el teorema de convolución, (3.9) se transforma en

$$\begin{aligned} q_r(s|x_0, x_r) &= q_0(s+r|x_0) + r q_0(s+r|x_r) q_r(s|x_0, x_r), \\ \therefore q_r(s|x_0, x_r) &= \frac{q_0(s+r|x_0)}{1 - r q_0(s+r|x_r)}, \end{aligned} \quad (3.10)$$

pero en (1.47) se había encontrado que

$$q_0(s|x_0) = \frac{1}{s} \left(1 - e^{-\sqrt{\frac{s}{D}} x_0}\right) \rightarrow q_0(s|x_r) = \frac{1}{s} \left(1 - e^{-\sqrt{\frac{s}{D}} x_r}\right),$$

sustituyendo este resultado en $q_r(s|x_0, x_r)$ se obtiene

$$\begin{aligned} q_r(s|x_0, x_r) &= \frac{\frac{1}{s+r} \left(1 - e^{-\sqrt{\frac{s+r}{D}} x_0}\right)}{1 - \frac{r}{s+r} \left(1 - e^{-\sqrt{\frac{s+r}{D}} x_r}\right)}, \\ &= \frac{1 - e^{-\sqrt{\frac{s+r}{D}} x_0}}{s + r - r \left(1 - e^{-\sqrt{\frac{s+r}{D}} x_r}\right)}, \\ \therefore q_r(s|x_0, x_r) &= \frac{1 - e^{-\sqrt{\frac{s+r}{D}} x_0}}{s + r e^{-\sqrt{\frac{s+r}{D}} x_r}}, \end{aligned} \quad (3.11)$$

mismo resultado que en (3.7). El promedio en el primer tiempo de arribo se obtiene haciendo $s = 0$ en (3.11), es decir

$$\langle T_r \rangle = \frac{1 - e^{-\sqrt{\frac{r}{D}} x_0}}{r e^{-\sqrt{\frac{r}{D}} x_r}} = \frac{e^{\sqrt{\frac{r}{D}} x_r} \left(1 - e^{-\sqrt{\frac{r}{D}} x_0}\right)}{r}. \quad (3.12)$$

Notar que el caso de difusión libre se recupera tomando el límite $r \rightarrow 0$ en (3.12), es decir se obtiene un tiempo de primer arribo que diverge.

3.2.1. Efecto de x_0 sobre el tiempo medio de primer arribo

La forma funcional de (3.12) indica un comportamiento claro para $\langle T_r \rangle$ en función de x_0 y x_r , es decir que, a medida que la posición inicial aumenta el término exponencial que contiene la información de esta posición se vuelve irrelevante. Esto de manera contraria al comportamiento que tiene $\langle T_r \rangle$ con respecto a la posición de reinicio. Desde (3.12) se concluye que éste diverge de manera exponencial cuando la posición de reinicio toma valores muy grandes a r fijo. Este comportamiento se puede observar en la Fig. 3.2 donde se ha graficado el tiempo promedio de captura como función de la tasa de reinicio para diferentes posiciones iniciales dada una posición de reinicio.

De hecho las gráficas en Fig. 3.2 indican que al aumentar la posición de reinicio, el tiempo promedio de primer arribo mínimo aumenta mientras que su tasa de reinicio r^* óptima decrece, como es de esperar. Más aún, las curvas para cada uno de los valores en x_r tienden a un límite

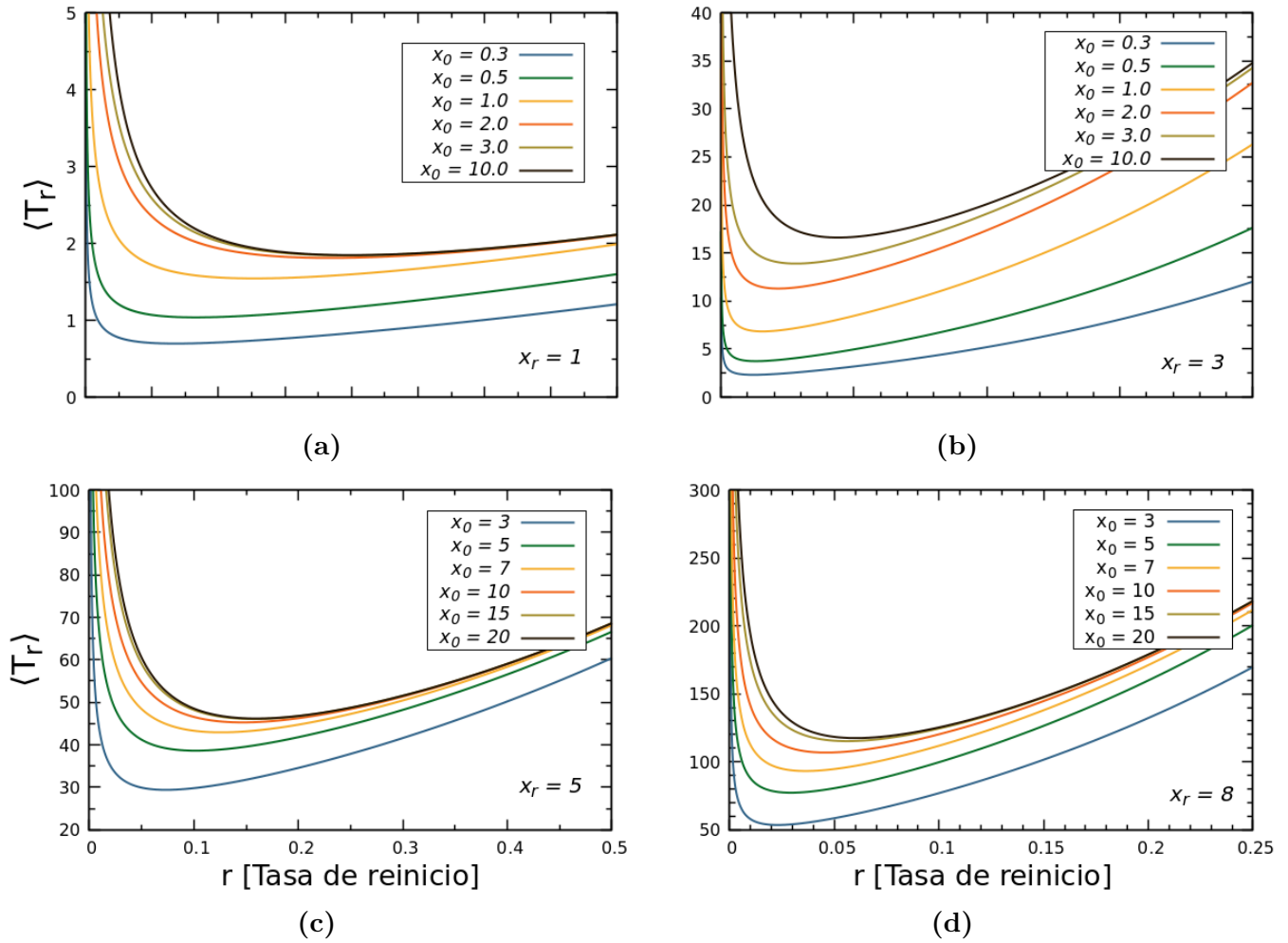


Figura 3.2: Tiempo promedio de primer arribo $\langle T_r \rangle$ en función de la tasa de reinicio r para diferentes valores de la posición inicial x_0 . La posición de reinicio es diferente para cada gráfica; se tomaron los valores $x_r = [1, 3, 5, 8]$, respectivamente y un valor de 1.0 para la constante de difusión.

a medida de que x_0 aumenta. De aquí se desprende el hecho de que las tasas de reinicio óptimas tiendan a un valor en específico cuando x_0 aumenta. Uno puede calcular este valor óptimo r^* , mediante la optimización de (3.12) respecto a r :

$$\left[\frac{d \langle T_r \rangle}{dr} \right]_{r=r^*} = 0.$$

Se obtiene

$$\frac{d \langle T_r \rangle}{dr} = \frac{d}{dr} \frac{e \sqrt{\frac{r}{D}} x_r}{r} - \frac{d}{dr} \frac{e \sqrt{\frac{r}{D}} (x_r - x_0)}{r} = 0$$

con

$$\begin{aligned}\frac{d}{dr} \frac{e^{\sqrt{\frac{r}{D}} x_r}}{r} &= \frac{1}{r^2} \left(\sqrt{\frac{r}{D}} \frac{x_r}{2} e^{\sqrt{\frac{r}{D}} x_r} - e^{\sqrt{\frac{r}{D}} x_r} \right) \\ \frac{d}{dr} \frac{e^{\sqrt{\frac{r}{D}} (x_r - x_0)}}{r} &= \frac{1}{r^2} \left[\sqrt{\frac{r}{D}} \frac{(x_r - x_0)}{2} e^{\sqrt{\frac{r}{D}} (x_r - x_0)} - e^{\sqrt{\frac{r}{D}} (x_r - x_0)} \right],\end{aligned}$$

de tal manera que la única expresión que puede llegar a ser cero es

$$\sqrt{\frac{r^*}{D}} \frac{x_r}{2} e^{\sqrt{\frac{r^*}{D}} x_r} - e^{\sqrt{\frac{r^*}{D}} x_r} = \sqrt{\frac{r^*}{D}} \frac{(x_r - x_0)}{2} e^{\sqrt{\frac{r^*}{D}} (x_r - x_0)} - e^{\sqrt{\frac{r^*}{D}} (x_r - x_0)}, \quad (3.13)$$

donde ya se ha evaluado en $r = r^*$.

Podemos sacar conclusiones poniendo algunas condiciones sobre x_0 en (3.13), por ejemplo, cuando $x_0 \rightarrow 0$ y $x_0 \rightarrow \infty$ ¿Cómo depende r^* de las posiciones de inicio y reinicio? El caso $x_0 \rightarrow \infty$ es el más fácil porque el resultado sigue de (3.13) después de algunas manipulaciones; la ecuación para r^* se puede reescribir de la siguiente manera, para todo x_0 y x_r positivos

$$\sqrt{\frac{r^*}{D}} \frac{x_r}{2} - 1 = \sqrt{\frac{r^*}{D}} \frac{(x_r - x_0)}{2} e^{-\sqrt{\frac{r^*}{D}} x_0} - e^{-\sqrt{\frac{r^*}{D}} x_0} \quad (3.14)$$

y al hacer $x_0 \rightarrow \infty$ uno puede ver cómo (3.14) se reduce a

$$r^* = \frac{4D}{x_r^2}. \quad (3.15)$$

Por otra parte, cuando $x_0 \rightarrow 0$, se puede hacer un desarrollo en serie de Taylor para la ecuación (3.14)

$$\begin{aligned}\alpha_0 \frac{x_r}{2} e^{\alpha_0 x_0} - e^{\alpha_0 x_0} &= \alpha_0 \frac{(x_r - x_0)}{2} - 1 \\ \alpha_0 \frac{(x_r - x_0)}{2} - 1 &\approx \alpha_0 \frac{x_r}{2} \left(1 + \alpha_0 x_0 + \frac{1}{2} (\alpha_0 x_0)^2 \right) - 1 - \alpha_0 x_0 - \frac{1}{2} \alpha_0^2 x_0^2 \\ \alpha_0 \frac{x_r}{2} - \alpha_0 \frac{x_0}{2} - 1 &\approx \alpha_0 \frac{x_r}{2} + \alpha_0^2 \frac{x_0 x_r}{2} + \alpha_0^3 \frac{x_0^2 x_r}{4} - 1 - \alpha_0 x_0 - \frac{1}{2} \alpha_0^2 x_0^2 \\ \alpha_0 \frac{x_r}{2} - \alpha_0 \frac{x_0}{2} &\approx \alpha_0 \frac{x_r}{2} + \alpha_0^2 \frac{x_0 x_r}{2} + \alpha_0^3 \frac{x_0^2 x_r}{4} - \alpha_0 x_0 - \frac{1}{2} \alpha_0^2 x_0^2 \\ -\alpha_0 \frac{x_0}{2} &= -\alpha_0^2 \frac{x_0 x_r}{2} - \alpha_0^3 \frac{x_0^2 x_r}{4} + \alpha_0 x_0 + \frac{1}{2} \alpha_0^2 x_0^2\end{aligned}$$

ó

$$\alpha_0^2 \frac{x_0 x_r}{2} = \alpha_0 (x_0 - x_r) + 1$$

donde se ha usado la definición $\alpha_0 = \sqrt{r^*/D}$; en el límite cuando $x_0 = 0$ la ecuación anterior se reduce a una expresión análoga a aquella en (3.15): $\alpha_0 x_r = 1$. Usando la definición de α_0 podemos poner a r^* como función de x_r , esto es

$$r^* = \frac{D}{x_r^2} \quad (3.16)$$

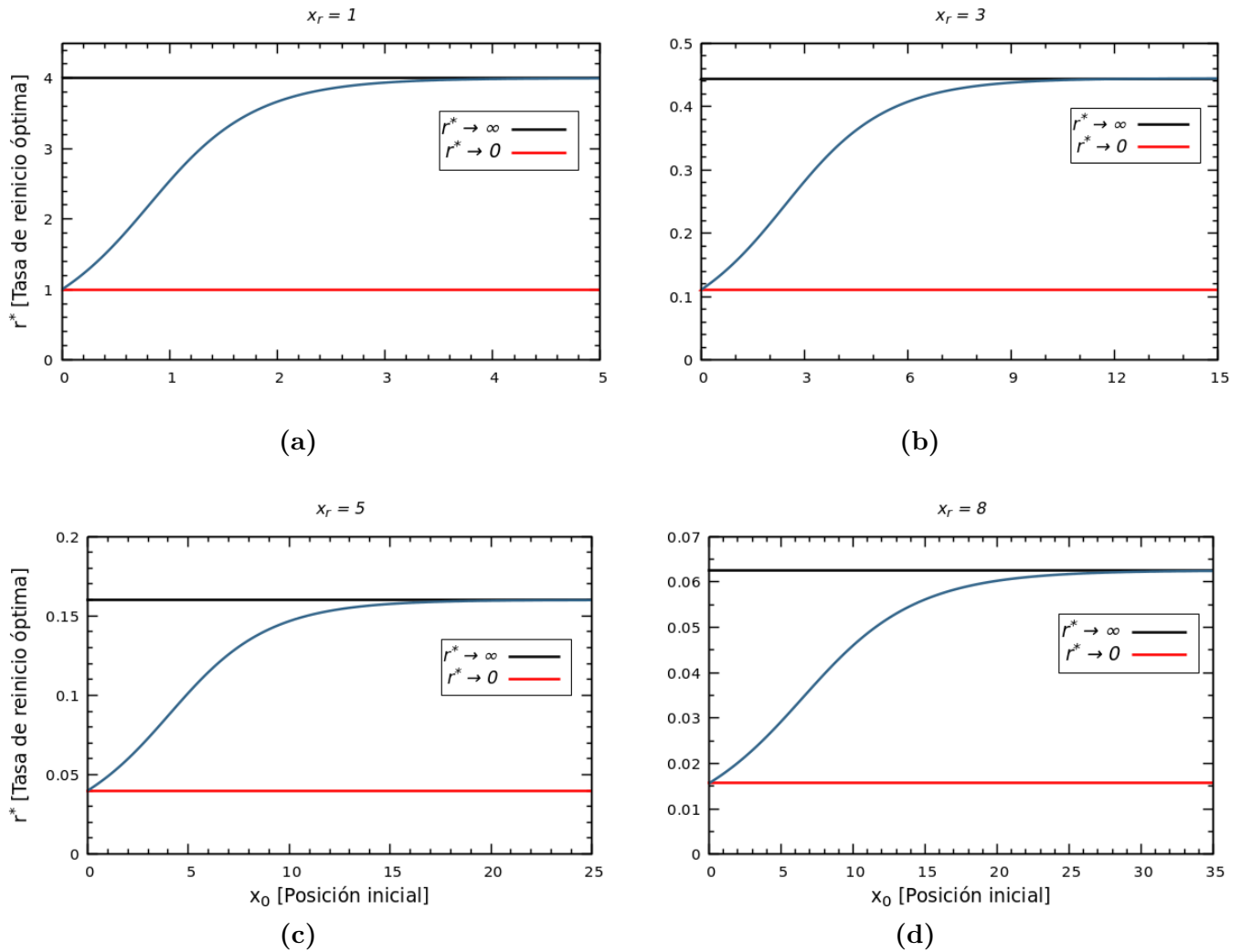


Figura 3.3: Tasa de reinicio óptima en función de la posición inicial. Las líneas azules son resultados numéricos. En cada una de las gráficas se ha usado $D = 1$ para la constante de difusión.

es decir, cuando $x_0 = 0$ las tasas de reinicio óptimas tienden a un valor límite D/x_r^2 .

Estos resultados se resumen en la Fig. 3.3, en donde se presentan soluciones numéricas a la ecuación (3.14) para r^* en función de x_0 (líneas azules) y también se incluyen las ecuaciones (3.15) y (3.16) en cada una de las gráficas, representadas por las líneas horizontales. Se observa cómo estas ecuaciones representan respectivamente la cota superior y la inferior para r^* como función de la posición inicial. Es interesante percatarse que no importa dónde inicia la partícula su recorrido, su tasa de reinicio óptima siempre caerá en el intervalo

$$\frac{D}{x_r^2} \leq r^* \leq \frac{4D}{x_r^2},$$

siendo este únicamente dependiente de la posición de reinicio x_r .

La tabla 3.1 lista diferencias entre $r^*(x_0)$ y r_∞^* , indicadas en porcentajes conforme x_0 crece. Estos mismos apuntan a una buena convergencia hacia $r_\infty^* \rightarrow 4D/x_r^2$ por parte de los resultados numéricos conforme la posición inicial aumenta.

	$r_\infty = 4$	$x_r = 1$		$r_\infty = 0.44$	$x_r = 3$
x_0	r_{num}	diferencia %	x_0	r_{num}	diferencia %
1	2.53	36.5	3	0.28	36.3
2	3.66	8.3	6	0.4	8.2
3	3.98	1.5	9	0.43	1.5
4	3.98	0.2	12	0.44	0.2
5	3.99	0.04	15	0.44	0.04

(a)

	$r_\infty = 0.16$	$x_r = 5$		$r_\infty = 0.06$	$x_r = 8$
x_0	r_{num}	diferencia %	x_0	r_{num}	diferencia %
5	0.1	36.4	7	0.03	42
10	0.14	8.2	14	0.05	12
15	0.15	1.5	21	0.06	2
20	0.15	0.2	28	0.06	0.6
25	0.15	0.04	35	0.06	0.1

(b)

Tabla 3.1: Las tablas (a) y (b) muestran la diferencia porcentual que hay entre la tasa óptima de reinicio y su valor límite cuando $x_0 \rightarrow \infty$, correspondiente para cada posición de reinicio según la ecuación (3.15).

3.2.2. Posición inicial distribuida uniformemente

En esta sección se plantea analizar el tiempo promedio de captura para el caso en que la posición inicial se distribuye uniformemente a lo largo de dos intervalos: aquel que va del punto absorbente en $x_T = 0$ hasta la posición de reinicio x_r aquel en donde x_0 se distribuye en el intervalo $[0, \infty)$.

Para el primer caso, la partícula puede iniciar con igual probabilidad

$$p(x_0) dx_0 = \frac{1}{x_r - x_T} dx_0 = \frac{dx_0}{x_r}$$

en el intervalo $[x_T, x_r]$, ver Fig. 3.4. Para este fin, se promedia la expresión del tiempo promedio de captura en (3.12) sobre todas las posibles posiciones iniciales en el intervalo antes mencionado:

$$\begin{aligned} \langle T_r(r|x_r) \rangle_{x_0} &= \int_{x_T}^{x_r} dx_0 p(x_0) \langle T_r(r|x_0, x_r) \rangle = \frac{1}{r e^{-\sqrt{\frac{r}{D}} x_r}} \int_0^{x_r} \frac{dx_0}{x_r} \left(1 - e^{-\sqrt{\frac{r}{D}} x_0} \right) \\ &= \frac{1}{r e^{-\sqrt{\frac{r}{D}} x_r}} \int_0^{x_r} \frac{dx_0}{x_r} - \frac{1}{r e^{-\sqrt{\frac{r}{D}} x_r}} \int_0^{x_r} dx_0 e^{-\sqrt{\frac{r}{D}} x_0} \\ &= \frac{e^{\sqrt{\frac{r}{D}} x_r}}{r} + \frac{e^{\sqrt{\frac{r}{D}} x_r}}{r x_r} \sqrt{\frac{D}{r}} \left[e^{-\sqrt{\frac{r}{D}} x_r} - 1 \right] \\ &= \frac{e^{\sqrt{\frac{r}{D}} x_r}}{r} + \sqrt{\frac{D}{r}} \frac{1}{r x_r} - \frac{\sqrt{D} e^{\sqrt{\frac{r}{D}} x_r}}{r^{3/2} x_r} \\ \therefore \langle T_r(r|x_r) \rangle_{x_0} &= \frac{e^{\sqrt{\frac{r}{D}} x_r}}{r} \left(1 - \sqrt{\frac{D}{r}} \frac{1}{x_r} \right) + \frac{\sqrt{D}}{r^{3/2} x_r}, \end{aligned}$$

dónde $\langle \rangle_{x_0}$ indica promedio sobre las posibles posiciones iniciales. La última expresión también se puede reescribir como

$$\langle T_r(r|x_r) \rangle_{x_0} = \frac{e^{\sqrt{\frac{r}{D}} x_r} \left(\sqrt{r} x_r + \sqrt{D} e^{-\sqrt{\frac{r}{D}} x_r} - \sqrt{D} \right)}{r^{3/2} x_r}, \quad (3.17)$$

esta forma de la ecuación para $\langle T_r(r|x_r) \rangle_{x_0}$ es más conveniente porque permite verificar que $\langle T_r(r|x_r) \rangle_{x_0}$ siempre sea una cantidad positiva; en este caso siempre lo es porque

$$\sqrt{r} x_r + \sqrt{D} e^{-\sqrt{\frac{r}{D}} x_r} > \sqrt{D}$$

siempre se cumple para cualquier valor de la constante de difusión, debido a la concavidad de la función e^{-z} . En este caso, y de forma similar a la ecuación (3.12), el tiempo promedio de captura en (3.17) crece exponencialmente con la posición x_r ; hecho que era de esperarse porque, de manera intuitiva uno puede llegar a la conclusión de que a la partícula le tomará mucho más tiempo llegar a $x_T = 0$ si la posición a la que está continuamente reiniciando es mucho mayor que 0, es decir si $x_r \rightarrow \infty$. La Fig. 3.5 captura este comportamiento.

Ahora derivemos (3.17) con respecto a la tasa de reinicio r para encontrar su mínimo. Esto se logra resolviendo la ecuación:

$$\left[\frac{d}{dr} \langle T_r(r|x_r) \rangle_{x_0} \right]_{r=r^*} = 0,$$

pero

$$\frac{d}{dr} \langle T_r(r|x_r) \rangle_{x_0} = \frac{d}{dr} \frac{e^{\sqrt{\frac{r}{D}} x_r} \left(\sqrt{r} x_r + \sqrt{D} e^{-\sqrt{\frac{r}{D}} x_r} - \sqrt{D} \right)}{r^{3/2} x_r}$$

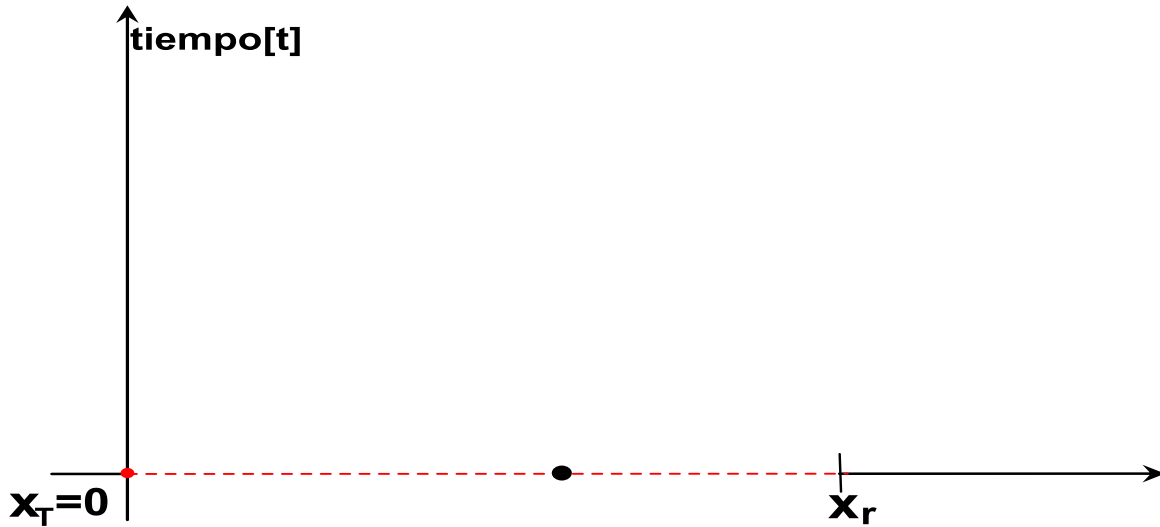


Figura 3.4: Una partícula Browniana con posición de reinicio en x_r y blanco absorbente en $x_T = 0$ cuya posición inicial se ha distribuido uniformemente sobre el intervalo $[0, x_r]$ (línea roja punteada).

$$= \frac{1}{\left(e^{-\sqrt{\frac{r}{D}}x_r} r^{3/2} x_r\right)^2} \left[\left(e^{-\sqrt{\frac{r}{D}}x_r} r^{3/2} x_r\right) \left(\frac{x_r}{2\sqrt{r}} - \frac{x_r e^{-\sqrt{\frac{r}{D}}x_r}}{2\sqrt{r}}\right) \right]$$

$$- \frac{x_r e^{-\sqrt{\frac{r}{D}}x_r}}{\left(e^{-\sqrt{\frac{r}{D}}x_r} r^{3/2} x_r\right)^2} \left[\left(\sqrt{r}x_r + \sqrt{D}e^{-\sqrt{\frac{r}{D}}x_r} - \sqrt{D}\right) \left(\frac{3\sqrt{r}}{2} - \frac{rx_r}{2\sqrt{D}}\right) \right] = 0,$$

por lo tanto, lo único que puede ser cero es (en este punto se evita poner r^* porque dificultaría la claridad en las expresiones, pero la r a continuación efectivamente es r^*)

$$r^{3/2} \left(\frac{x_r}{2\sqrt{r}} - \frac{x_r e^{-\sqrt{\frac{r}{D}}x_r}}{2\sqrt{r}}\right) - \left(\sqrt{r}x_r + \sqrt{D}e^{-\sqrt{\frac{r}{D}}x_r} - \sqrt{D}\right) \left(\frac{3\sqrt{r}}{2} - \frac{rx_r}{2\sqrt{D}}\right) = 0$$

y simplificando la expresión se tiene

$$\frac{r^* x_r^2}{2D} - \frac{3}{2} \sqrt{\frac{r^*}{D}} x_r - \frac{3}{2} e^{-\sqrt{\frac{r^*}{D}}x_r} + \frac{3}{2} = 0. \quad (3.18)$$

La ecuación (3.18) resulta ser una ecuación trascendental para r^* , con una combinación de r^* , D y x_r que nos permite hacer el cambio de variable $\gamma_r = \sqrt{\frac{r^*}{D}}x_r$. Con esto la ecuación anterior se

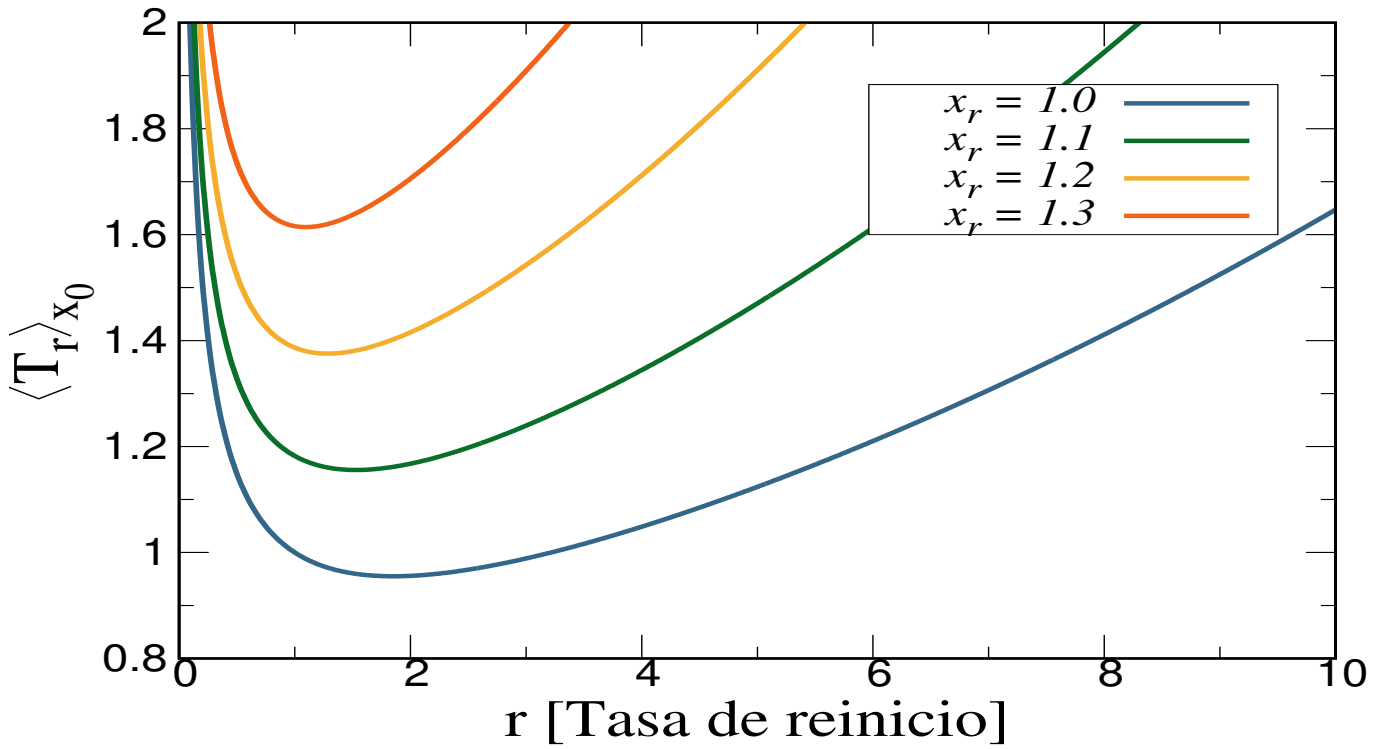


Figura 3.5: Comportamiento del tiempo promedio de captura $\langle T_r(r|x_r) \rangle_{x_0}$ en función de la tasa de reinicio para diferentes posiciones x_r .

puede reescribir en términos de una variable γ_r

$$\frac{\gamma_r^2}{2} - \frac{3}{2}\gamma_r - \frac{3}{2}e^{-\gamma_r} = -\frac{3}{2}. \quad (3.19)$$

La última ecuación se puede resolver con **Mathematica** y sólo tiene una solución en $\gamma_r = 1.36078$. De esto último se concluye que

$$\begin{aligned} \gamma_r &= 1.36078 = \sqrt{\frac{r^*}{D}} x_r \\ \therefore r^* &= \frac{\gamma_r^2 D}{x_r^2} \approx \frac{37 D}{20 x_r^2}. \end{aligned} \quad (3.20)$$

En la Fig. 3.6 se grafica la ecuación (3.20) como función de x_r a D fija.

Ahora, consideremos un intervalo de condiciones iniciales $[0, \infty)$ e introduzcamos un parámetro auxiliar X cuyo valor es muy grande pero finito, después se hará el límite $X \rightarrow \infty$ para tomar el caso antes mencionado. El parámetro X es introducido para poder promediar, de manera uniforme, el tiempo promedio de captura con respecto a las posiciones iniciales en el intervalo antes mencionado.

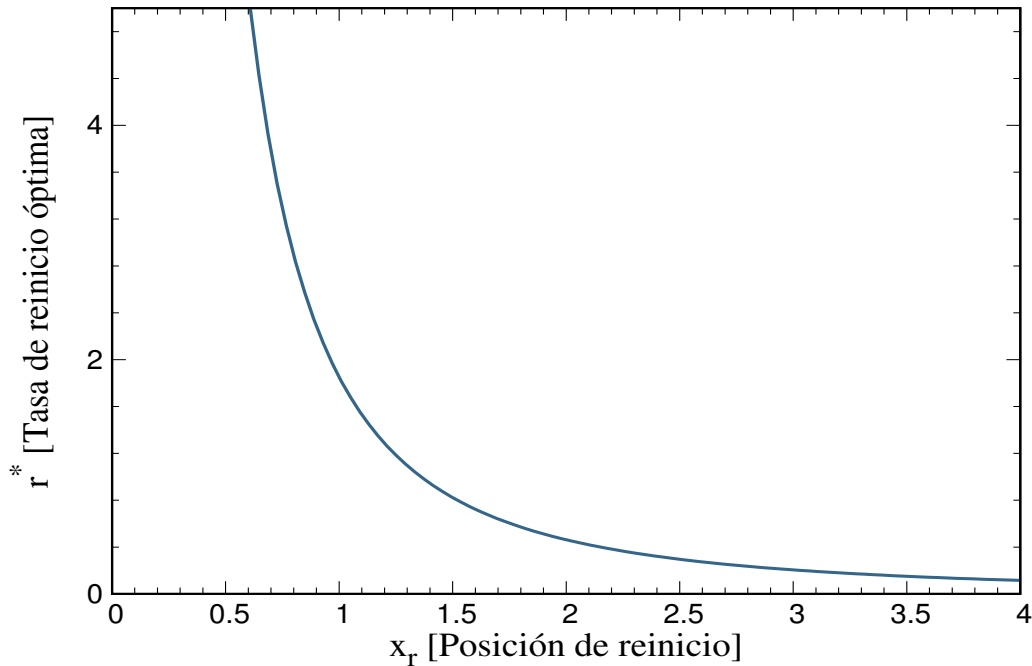


Figura 3.6: r^* en función de x_r cuya forma funcional está dada por la ecuación (3.20) con $D = 1$.

Primero se distribuyen las posiciones iniciales desde a $x_T = 0$ a X de manera uniforme

$$\begin{aligned} \langle T_r \rangle_X &= \frac{1}{X - x_T} \int_{x_T}^X dx_0 \langle T_r(x_0) \rangle = \frac{e^{\alpha_0 x_r}}{rX} \int_{x_T}^X (1 - e^{-\alpha_0 x_0}) dx_0 \\ &= \frac{e^{\alpha_0 x_r}}{r} + \frac{e^{\alpha_0 x_r}}{\alpha_0 r X} [e^{-\alpha_0 X} - 1], \end{aligned}$$

por lo tanto en el límite de $X \rightarrow \infty$ se tiene

$$\langle T_r \rangle = \lim_{X \rightarrow \infty} \langle T_r \rangle_X = \frac{e^{\alpha_0 x_r}}{r}. \quad (3.21)$$

Es decir, cuando se distribuyen las posiciones iniciales sobre el intervalo $[0, \infty)$, el tiempo promedio de captura tiene un crecimiento exponencial con la posición de reinicio y por tanto divergente para este parámetro. Como para los otros casos, este es un resultado intuitivo dado la naturaleza del mecanismo de reinicio.

Finalmente, se debe mostrar que las tasas de reinicio óptimas r^* siempre adquieren un valor en el límite inferior $r^* = D/x_r^2$ mostrado anteriormente en (3.16). Esto es

$$\left. \frac{d}{dr} \langle T_r \rangle_{x_0} \right|_{r=r^*} = 0 \Rightarrow \alpha_0 x_r - 1 = 0.$$

Lo cual implica $r^* = D/x_r^2$, resultado que indica que cuando las posiciones iniciales se distribuyen uniformemente las tasas de reinicio óptimas toman el límite inferior D/x_r^2 , un límite que ocurre para posiciones iniciales muy pequeñas en la [Fig. 3.3]. En otras palabras, haber distribuido las posiciones iniciales en $[0, \infty)$ tiene el mismo efecto en r^* que tomar $x_0 \rightarrow 0$ en (3.14).

3.3. Dos paredes absorbentes

3.3.1. Probabilidad de supervivencia en un intervalo $[a,b]$

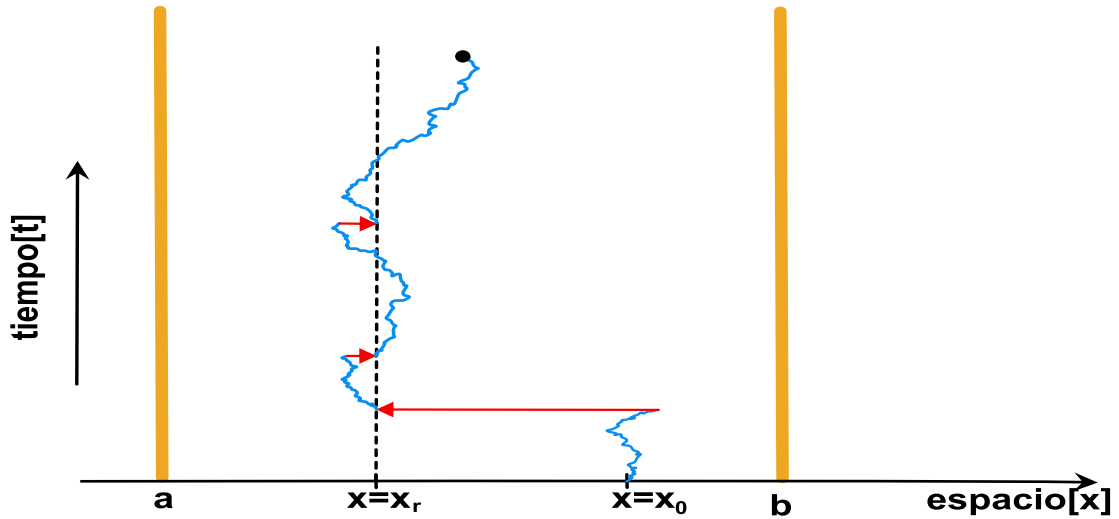


Figura 3.7: Esquema de una partícula con reinicio dentro de dos paredes absorbentes.

Ahora se considera un sistema en el cual una partícula se difunde en un intervalo finito $[a, b]$ con el mecanismo de reinicio incorporado (ver Fig. 3.7). La ecuación de Fokker-Planck hacia atrás correspondiente se obtiene integrando con respecto a x (posición final) la ecuación (2.39) sobre todo el intervalo $[a, b]$ para obtener la probabilidad de supervivencia $S(t|x_0)$

$$\frac{\partial S_r(t|x_0)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 S_r(t|x_0)}{\partial x_0^2} + r S_r(t|x_r) - r S_r(t|x_0) \quad (3.22)$$

en donde el término dependiente de x_r indica que la partícula empieza en la posición de reinicio x_r en $t = 0$ y las condiciones de frontera $S_r(t|x_0 = a) = S_r(t|x_0 = b) = 0$ son impuestas. Partimos nuevamente de la ecuación (3.3) para la transformada de Laplace en $S_r(t|x_0)$

$$D \frac{\partial^2 q_r(s|x_0)}{\partial x_0^2} - (r + s) q_r(s|x_0) = -1 - r q_r(s|x_r). \quad (3.23)$$

En esta ecuación el término $q_r(s|x_r)$ es una constante ya que no depende de x_0 . Sin embargo, la variable dependiente $q_r(s|x_0)$ sí depende de x_r . Las condiciones de frontera siguen siendo homogéneas: $q_r(s|x_0 = a) = q_r(s|x_0 = b) = 0$.

Al resolver la ecuación homogénea asociada a (3.23)

$$D \frac{\partial^2 q_r(s|x_0)}{\partial x_0^2} - (r+s) q_r(s|x_0) = 0$$

se propone la solución

$$q_h(s, x_0) = A \sinh \alpha x_0 + B \cosh \alpha x_0, \quad (3.24)$$

donde se ha usado la notación $\alpha = \sqrt{\frac{r+s}{D}}$. En vista de que la parte no homogénea en (3.23) es una constante en x_0 se propone que la solución general $q(s, x_0) = q_h(s, x_0) + q_p(s, x_0)$ sea

$$q_r(s, x_0) = q_h(s, x_0) + C \quad (3.25)$$

donde C es una constante para dar cuenta de la parte no homogénea de la ecuación (3.23) y representa la solución particular al problema. Ahora, en torno a (3.25) se impondrán las condiciones necesarias para encontrar aquellas constantes que aún están indeterminadas. Al imponer la condición de frontera $q(s, x_0 = a) = 0$ se obtiene

$$\begin{aligned} 0 &= A \sinh \alpha a + B \cosh \alpha a + C \\ \therefore C &= -A \sinh \alpha a - B \cosh \alpha a, \end{aligned}$$

de aquí que (3.25) se reescriba

$$q_r(s, x_0) = A \sinh \alpha x_0 + B \cosh \alpha x_0 - A \sinh \alpha a - B \cosh \alpha a.$$

Ahora se impone la segunda condición de frontera $q_h(s, x_0 = b) = 0$

$$\begin{aligned} 0 &= A \sinh \alpha b + B \cosh \alpha b - A \sinh \alpha a - B \cosh \alpha a \\ 0 &= A (\sinh \alpha b - \sinh \alpha a) + B (\cosh \alpha b - \cosh \alpha a) \\ \therefore B &= -\frac{A (\sinh \alpha b - \sinh \alpha a)}{\cosh \alpha b - \cosh \alpha a}. \end{aligned}$$

Con este resultado podemos llegar a una forma simplificada para $q_r(s|x_0)$

$$q_r(s, x_0) = A \frac{\sinh \alpha (x_0 - b) + \sinh \alpha (a - x_0) + \sinh \alpha (b - a)}{\cosh \alpha b - \cosh \alpha a}. \quad (3.26)$$

Finalmente, para encontrar la última constante A , es necesario sustituir la expresión (3.26) en la ecuación (3.23). Por definición, la parte homogénea dependiente de x_0 se cancela y obtenemos:

$$(r+s) A \frac{\sinh \alpha (b-a)}{\cosh \alpha b - \cosh \alpha a} = 1 + r A \frac{\sinh \alpha (x_r - b) + \sinh \alpha (a - x_r) + \sinh \alpha (b-a)}{\cosh \alpha b - \cosh \alpha a},$$

o

$$\frac{r A \sinh \alpha (b - x_r) + r A \sinh \alpha (x_r - a) + s A \sinh \alpha (b - a)}{\cosh \alpha b - \cosh \alpha a} = 1,$$

proporcionando así la constante A

$$A = \frac{\cosh \alpha b - \cosh \alpha a}{r \sinh \alpha (b - x_r) + r \sinh \alpha (x_r - a) + s \sinh \alpha (b - a)}. \quad (3.27)$$

Este resultado junto con (3.26) permite escribir la solución general a (3.23) de la siguiente manera

$$q_r(s, x_0|x_r) = \frac{\sinh \alpha (b - a) - \sinh \alpha (b - x_0) - \sinh \alpha (x_0 - a)}{r \sinh \alpha (b - x_r) + r \sinh \alpha (x_r - a) + s \sinh \alpha (b - a)}. \quad (3.28)$$

En el límite de $r \rightarrow 0$, toda información que alguna vez existió sobre la característica de reinicio deber ser borrada, recuperando así el sistema de una partícula yendo sólo en difusión libre en presencia de dos fronteras absorbentes.

3.4. Tiempo promedio de captura (TPC)

De acuerdo con $\langle T_r \rangle = \int_0^\infty t \left(-\frac{\partial S(t, x_0|x_r)}{\partial t} \right) dt = q(s = 0, x_0|x_r)$, en (3.28) simplemente se hace $s = 0$ para encontrar el tiempo promedio de captura $\langle T_r(x_0|x_r) \rangle$

$$\langle T_r \rangle = q(s = 0, x_0|x_r) = \frac{\sinh \alpha_0 (b - a) - \sinh \alpha_0 (b - x_0) - \sinh \alpha_0 (x_0 - a)}{r \sinh \alpha_0 (b - x_r) + r \sinh \alpha_0 (x_r - a)}. \quad (3.29)$$

Se debe notar que la tasa de reinicio r que contribuye a proporcionar las unidades correctas de tiempo en (3.29) siempre acompaña a los términos que contienen la información de x_r .

El comportamiento de $\langle T_r \rangle$ en presencia de las fronteras absorbentes es un tanto curioso. Si uno contempla el comportamiento de esta cantidad con respecto a r para algunos conjuntos de parámetros diferentes ($x_0, x_r, a = 0, b$) se dará cuenta hay dos tipos de comportamiento. En la figura Fig. 3.8 se ilustra lo anterior para dos diferentes locaciones de la frontera en $x = b$.

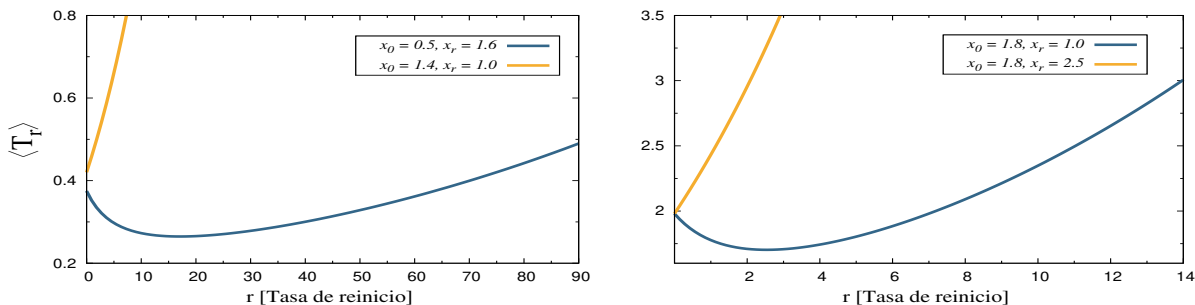


Figura 3.8: Partícula en difusión Browniana con reinicio en presencia de dos paredes absorbentes. De izquierda a derecha los valores para la posición de la frontera en $x = b$ son 2 y 4, respectivamente. La posición inicial x_0 y de reinicio x_r son diferentes. $D = 1$.

De Fig. 3.8 se revela que hay ciertas posiciones iniciales y de reinicio para las cuales $\langle T_r \rangle$ se puede optimizar, y por tanto obtener un $r^* > 0$ tal que el proceso de llegada a alguna de las dos

paredes absorbentes sea el óptimo. Sin embargo, según Fig. 3.8, también existen valores para estos parámetros que hacen inexistente algún valor de $r > 0$ que pueda optimizar el proceso. En este caso, el óptimo es $r^* = 0$.

En resumen, el hecho de que $\langle T_r \rangle$ se pueda optimizar para un valor finito en términos de la tasa de reinicio con paredes absorbentes depende enteramente de dónde inicie y dónde reinicie la partícula. De acuerdo a esto, pueden surgir preguntas más específicas como, entre la posición inicial y la de reinicio ¿cuál importa más a la hora de hacer óptimo el proceso? ¿Cuáles son los valores dentro del intervalo $[a, b]$ que pueden tomar x_0 y x_r para hacer de $\langle T_r \rangle$ un mínimo? ¿El coeficiente de difusión D juega un papel importante? La segunda pregunta podría ser respondida de manera cualitativa intuyendo que si las posiciones mencionadas toman valores cerca de las fronteras absorbentes, entonces probablemente $\langle T_r \rangle$ tenga un mínimo para una r^* . Por otra parte, en el contexto cuantitativo de las interrogantes es conveniente analizar en qué condición se cumple la desigualdad [58]

$$\left. \frac{d \langle T_r \rangle}{dr} \right|_{r \rightarrow 0} < 0. \quad (3.30)$$

Si se cumple (3.30), un poco de reinicio (r pequeño) es benéfico para el tiempo promedio de captura dado que disminuye. La interpretación de (3.30) puede darse de la siguiente manera: estamos seguros de encontrar algún $r^* > 0$ que minimiza $\langle T_r \rangle$ si la curva de tal cantidad es decreciente a medida que el parámetro r crece a partir de cero.

Ahora, gracias al formalismo de renovación podemos transformar la condición (3.30) a una forma mas práctica que sólo depende de propiedades del proceso sin reinicio, partiendo de (3.10). La transformada de Laplace para la probabilidad de supervivencia es

$$q_r(s|x_0, x_r) = \frac{q_0(r+s|x_0)}{1 - r q_0(s+r|x_r)}$$

donde q_0 es la correspondiente transformada de Laplace para la probabilidad de supervivencia sin reinicio. De la última ecuación su TPC se obtiene haciendo $s \rightarrow 0$

$$\langle T_r(x_0, x_r) \rangle = \frac{q_0(r|x_0)}{1 - r q_0(s|x_r)}, \quad (3.31)$$

pero

$$q_0(r|x_0) = \int_0^\infty dt e^{-rt} S_0(t|x_0),$$

donde $S_0(t|x_0)$ es la probabilidad de supervivencia para el sistema sin reinicio. Así que, haciendo un desarrollo en serie de Taylor para la exponencial dentro de la integral última se tiene

$$\begin{aligned} q_0(r|x_0) &= \int_0^\infty dt e^{-rt} S_0(t|x_0) = \int_0^\infty dt \left(1 - rt + \frac{r^2 t^2}{2} - \dots \right) S_0(t|x_0) \\ &= \int_0^\infty dt S_0(t|x_0) - r \int_0^\infty dt t S_0(t|x_0) + \frac{r^2}{2} \int_0^\infty dt t^2 S_0(t|x_0) - \dots, \end{aligned} \quad (3.32)$$

sin embargo sabemos que $\langle T_0 \rangle = \int_0^\infty dt S_0(t|x_0)$ y además

$$\begin{aligned} \langle T_0^2 \rangle &= - \int_0^\infty dt t^2 \frac{\partial S_0(t|x_0)}{\partial t} = \left[-t^2 S_0(t|x_0) \right]_0^\infty + 2 \int_0^\infty dt t S_0(t|x_0) \\ &\Rightarrow \langle T_0^2 \rangle = 2 \int_0^\infty dt t S_0(t|x_0), \end{aligned}$$

donde se ha supuesto que $S_0(t|x_0) \rightarrow 0$ a medida que $t \rightarrow \infty$ más rápido a cómo diverge t^2 cuando $t \rightarrow \infty$. Estos resultados resumidos en (3.32) conducen a la expresión

$$q_0(r|x_0) = \langle T_0(x_0) \rangle - \frac{r}{2} \langle T_0^2(x_0) \rangle + \dots, \quad (3.33)$$

y similarmente para $q_0(r|x_r)$. Sustituyendo este resultado en (3.31) se obtiene una expresión relativamente sencilla para $\langle T_r(x_0, x_r) \rangle$ en función de los momentos del TPC para la difusión en $[a, b]$ pero sin reinicio, notado como $\langle T_0 \rangle$. En esta expresión, se encuentran términos con condición inicial en x_0 y en x_r :

$$\langle T_r(x_0, x_r) \rangle = \frac{\langle T_0(x_0) \rangle - r \langle T_0^2(x_0) \rangle / 2 + \dots}{1 - r (\langle T_0(x_r) \rangle - r \langle T_0^2(x_r) \rangle / 2 \dots)}. \quad (3.34)$$

Todo lo que resta hacer es expandir (3.34) hasta primer orden en r , de donde identificamos:

$$\left. \frac{d}{dr} \langle T_r(x_0, x_r) \rangle \right|_{r \rightarrow 0} = \langle T_0^2(x_0) \rangle - 2 \langle T_0(x_0) \rangle \langle T_0(x_r) \rangle.$$

En virtud de la condición en (3.30) se concluye lo siguiente: el mecanismo de reinicio optimiza el TPC si se cumple la desigualdad

$$\langle T_0^2(x_0) \rangle - 2 \langle T_0(x_0) \rangle \langle T_0(x_r) \rangle > 0, \quad (3.35)$$

donde $\langle T_0(x_0) \rangle$, $\langle T_0^2(x_0) \rangle$ es el primer y segundo momento del tiempo promedio de captura para el caso de difusión libre (sin reinicio), respectivamente. Por lo tanto, es tan necesario como útil calcular el primer $\langle T_0 \rangle$ y segundo momento $\langle T_0^2 \rangle$ asociados al sistema en cuestión.

El primer momento puede ser obtenido de una manera relativamente fácil si se toma el límite en (3.29) cuando $r \rightarrow 0$

$$\langle T_0 \rangle = \lim_{r \rightarrow 0} \langle T_r \rangle = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\sinh \alpha_0 (b-a) - \sinh \alpha_0 (b-x_0) - \sinh \alpha_0 (x_0-a)}{r \sinh \alpha_0 (b-x_0) + r \sinh \alpha_0 (x_0-a)}$$

cuya solución puede ser encontrada haciendo un desarrollo en serie de Taylor: $\sinh x = x + \frac{x^3}{6} + \frac{x^5}{120} + \dots$; por lo tanto con algunas simplificaciones uno puede llegar al resultado

$$\lim_{r \rightarrow 0} \langle T_r \rangle = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{1}{r} \frac{\alpha_0^2 (b-a)^3 / 6 - \alpha_0^2 (b-x_0)^3 / 6 - \alpha_0^2 (x_0-a)^3 / 6 + O(\alpha_0^4)}{b-a + \alpha_0^2 (b-x_0)^3 / 6 + \alpha_0^2 (x_0-a)^3 / 6 + O(\alpha_0^4)}$$

pero $\alpha_0^2 = r/D$, y simplificaciones posteriores indican que el primer momento es

$$\lim_{r \rightarrow 0} \langle T_r(x_0) \rangle = \frac{(b-x_0)(x_0-a)}{2D}. \quad (3.36)$$

Este resultado se puede derivar directamente resolviendo la ecuación (3.23) con $r = s = 0$ y aplicando las condiciones de frontera [53].

El segundo momento resulta ser un poco más complicado de calcular, por lo que se toma la siguiente perspectiva donde se aprovecha que la transformada de Laplace en $q(s, x_0|x_r)$ es la generadora de momentos.

El segundo momento $\langle T_r \rangle$ se puede expresar de la siguiente manera

$$\langle T_r^2 \rangle = - \int_0^\infty dt t^2 \frac{\partial S(t|x_0, x_r)}{\partial t} = \left[-t^2 S_r(t|x_0, x_r) \right]_0^\infty + 2 \int_0^\infty dt t S_r(t|x_0, x_r),$$

y haciendo la suposición anterior de que $S_r(t \rightarrow \infty|x_0)$ decrece más rápido que t^2 se obtiene

$$\begin{aligned} \langle T_r^2 \rangle &= 2 \int_0^\infty dt t S_r(t|x_0, x_r) = \left[-2 \frac{d}{ds} \int_0^\infty dt e^{-st} S_r(t|x_0, x_r) \right]_{s=0} = \left[-2 \frac{d}{ds} q_r(s|x_0, x_r) \right]_{s=0}, \\ \therefore \langle T_r^2 \rangle &= -2 \frac{d}{ds} q_r(s|x_0, x_r) \Big|_{s=0} \end{aligned} \quad (3.37)$$

por lo tanto $\langle T_r^2 \rangle$ queda en términos de la transformada de Laplace en la probabilidad de supervivencia. El proceder del cálculo, a grandes rasgos consistirá en primero tomar el límite $r \rightarrow 0$ en (3.28) y luego derivar el resultado (posterior a una aproximación en serie de Taylor cuando $s \rightarrow 0$) con respecto a s . El límite $r \rightarrow 0$ es directo

$$\lim_{r \rightarrow 0} q(s, x_0) = \frac{\sinh \alpha_s (b-a) - \sinh \alpha_s (b-x_0) - \sinh \alpha_s (x_0-a)}{s \sinh \alpha_s (b-a)}, \quad \text{con } \alpha_s = \sqrt{\frac{s}{D}}.$$

Debe notarse como toda información del reinicio ha sido borrada incluyendo la posición x_r . Este resultado coincide con la transformada de Laplace para la probabilidad de supervivencia cuando la partícula Browniana no está sujeta al reinicio. La aproximación hasta primer orden de $q(s, x_0)$ es la siguiente expresión

$$\begin{aligned} q(s, x_0) \approx & \frac{(b-a)^3/6D + (a-x_0)^3/6D + (x_0-b)^3/6D}{(b-a) + s(b-a)^3/6D} \\ & + \frac{s(x_0-b)^5/120D^2 + s(a-x_0)^5/120D^2 + s(b-a)^5/120D^2}{(b-a) + s(b-a)^3/6D}. \end{aligned}$$

Una posterior aproximación del denominador a primer orden en s arroja el resultado

$$\begin{aligned} q(s, x_0) \approx & \left[(b-a)^3/6D + (a-x_0)^3/6D + (x_0-b)^3/6D \right] \left[\frac{1}{b-a} - s \frac{(b-a)}{6D} \right] \\ & + s \left[(x_0-b)^5/120D^2 + (a-x_0)^5/120D^2 + (b-a)^5/120D^2 \right] \left[\frac{1}{b-a} - s \frac{(b-a)}{6D} \right], \end{aligned}$$

cuya derivada es

$$\begin{aligned} \frac{dq(s, x_0)}{ds} &= \frac{(a-b)}{6D} [(b-a)^3/6D + (a-x_0)^3/6D + (x_0-b)^3/6D] \\ &+ \left[\frac{1}{b-a} - s \frac{(b-a)}{6D} \right] [(x_0-b)^5/120D^2 + (a-x_0)^5/120D^2 + (b-a)^5/120D^2] \\ &+ \frac{s(a-b)}{6D} [(x_0-b)^5/120D^2 + (a-x_0)^5/120D^2 + (b-a)^5/120D^2]. \end{aligned}$$

Sin embargo, lo complicado de la derivada se reduce considerablemente cuando tomamos el límite $s \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{ds} q(s|x_0, x_r) \right|_{s \rightarrow 0} &= \frac{(b-a)^5 + (x_0-b)^5 + (a-x_0)^5}{120D^2(b-a)} \\ &- \frac{(b-a) [(b-a)^3 + (x_0-b)^3 + (a-x_0)^3]}{36D^2}, \end{aligned}$$

resultado que de acuerdo a (3.37) forma parte del segundo momento (después de reducciones algebraicas)

$$\langle T_0^2(x_0) \rangle = -2 \left[\frac{d}{ds} q(s, x_0) \right]_{s \rightarrow 0} = \frac{(b-x_0)(x_0-a)}{12D^2} [a^2 + b^2 - 3ab + bx_0 - x_0^2 + ax_0]. \quad (3.38)$$

Sustituyendo (3.36) y (3.38) en la condición (3.35) obtenemos

$$a^2 + b^2 + 3ab + bx_0 - x_0^2 + ax_0 - 6bx_r + 6x_r^2 - 6ax_r > 0.$$

Sin perder generalidad, escogemos $a = 0$, con lo cual la última desigualdad se simplifica considerablemente

$$6u_r^2 - 6u_r - u_0^2 + u_0 + 1 > 0 \quad (3.39)$$

donde se han definido las nuevas variables como $u_0 = x_0/b$ y $u_r = x_r/b$ que tienen un rango de variación $0 < u_0, u_r < 1$.

La desigualdad define dos zonas diferentes. Cuando el lado izquierdo de (3.39) es mayor que cero (dados los valores u_r y u_0) el reinicio es benéfico y existe una tasa de reinicio óptima $r^* > 0$, finita. El caso complementario cuando el lado izquierdo de esta desigualdad es estrictamente menor que cero, tenemos $r^* = 0$. Finalmente, el caso de la igualdad en (3.39) define la separación de estas dos zonas contruida por los puntos

$$u_{r\pm} = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{2}{3}(u_0^2 - u_0 - 1)}. \quad (3.40)$$

Esta ecuación se ha obtenido resolviendo (3.39) como una ecuación cuadrática para u_r . Ver por ejemplo la [Fig. 3.9], donde se ha graficado el “diagrama de fase” en el plano (u_0, u_r) de acuerdo a esta ecuación. Consideramos que vale la pena calcular el valor de u_0 tal que u_r alcance los valores

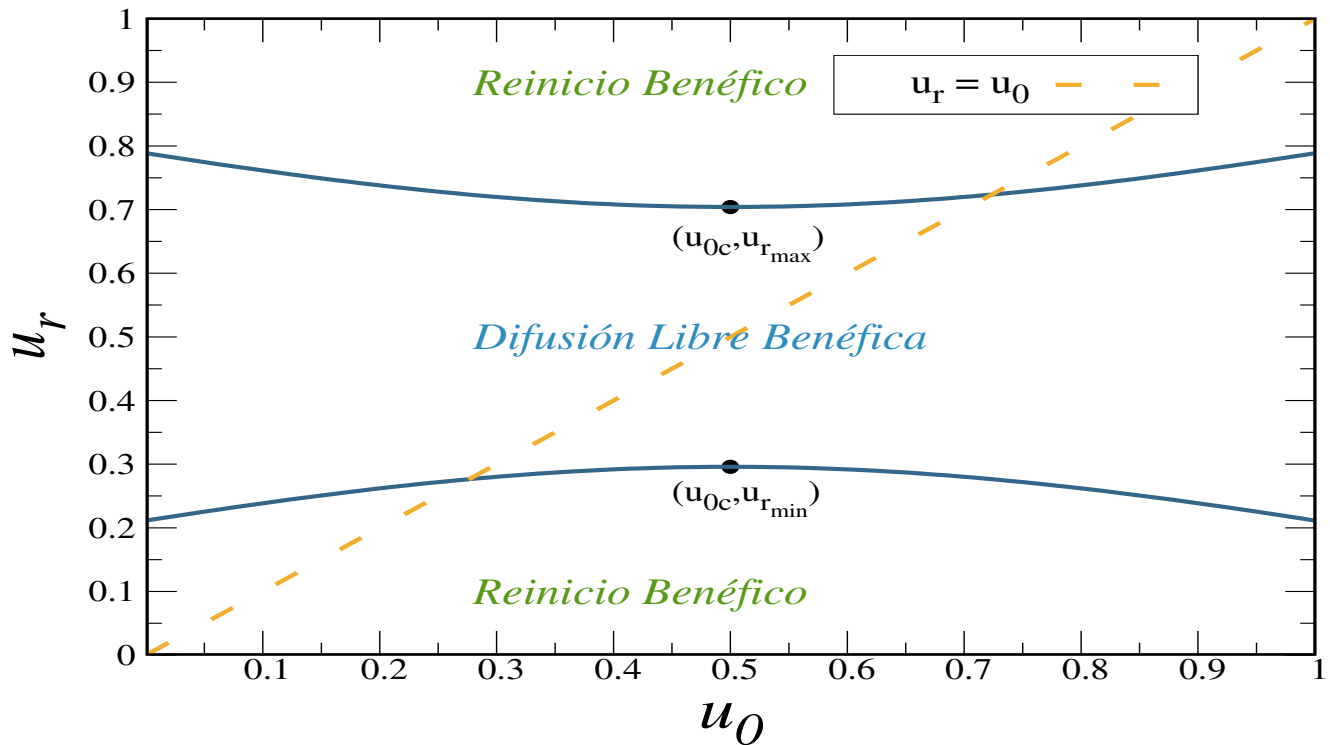


Figura 3.9: Diagrama con curvas azules críticas que indican las zonas d ónde el TPC puede ser óptimizado. La curva amarilla corresponde a $u_r = u_0$.

extremos sugeridos en la Fig. 3.9. Ahora, derivemos implícitamente con respecto a u_0 el caso de la igualdad en (3.39)

$$\frac{d}{du_0} [6u_r^2 - 6u_r - u_0^2 + u_0 + 1] = 0.$$

El resultado simplemente es $12u_r u_r' - 6u_r' - 2u_0 + 1 = 0$ donde u_r' representa la primera derivada du_r/du_0 . Al despejar u_r' de esta última ecuación tenemos $u_r' = (2u_0 - 1)/(12u_r - 6)$. Por lo tanto, podemos concluir que el valor $u_{0c} = 1/2$ es aquel que anula la derivada u_r' . Si se sustituye de vuelta el valor de u_{0c} en la ecuación (3.40) podemos encontrar los puntos $(u_{0c}, u_{r\min})$ y $(u_{0c}, u_{r\max})$ que en conjunto definen la zona más amplia donde el mecanismo de reinicio ayuda a completar el proceso de búsqueda para alguna $r^* > 0$. Sustituyendo este valor encontramos las soluciones $u_{r\max} = 0.7041\dots$ y $u_{r\min} = 0.2958\dots$ que pueden definir una zona

$$\mathcal{S}_1 = [(0, u_{r\min}) \cup (u_{r\max}, 1)] \quad (3.41)$$

donde el mecanismo de reinicio verdaderamente optimice la búsqueda y otra zona $\mathcal{S}_2 = (u_{r\min}, u_{r\max})$ donde no sea el caso. Importante mencionar que tales intervalos \mathcal{S}_1 y \mathcal{S}_2 sólo son válidos para $u_{0c} = 1/2$ fijo. Queremos reiterar que para cualquier otro valor $u_0 \neq u_{0c}$ también existe una zona donde el reinicio ayuda a la partícula Browniana a llegar a alguno de los blancos objetivos, ver Fig. 3.9, sin embargo esta zona no será tan amplia como aquella en (3.41).

Finalmente, debemos notar la sutil diferencia entre u_{r-} , u_{r+} y los valores $u_- = 0.2763\dots$, $u_+ = 0.7236\dots$ reportados en [57] por Pal et al; esto es, en el caso $u_{0c} = 1/2$ entonces $u_{r-} > u_-$ y $u_{r+} < u_+$ haciendo de $\mathcal{S}_1 > \mathcal{D} = [(0, u_-) \cup (u_+, 1)]$. En pocas palabras, la incorporación de $x_0 \neq x_r$

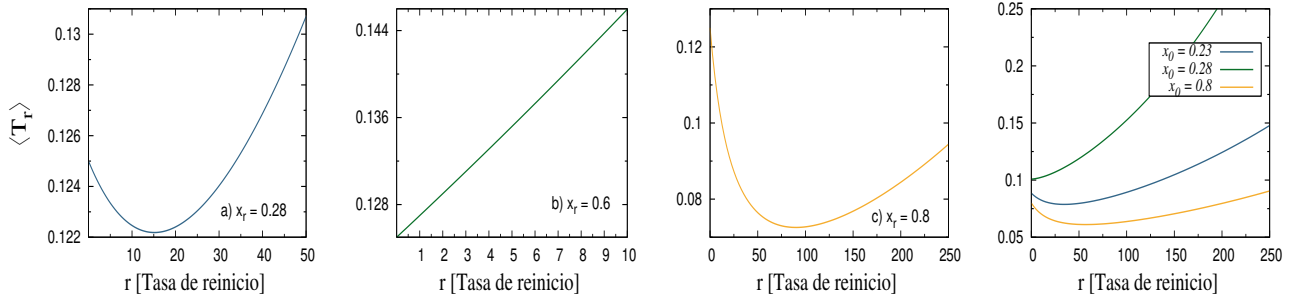


Figura 3.10: De izquierda a derecha, en los primeros tres cuadros de la figura se grafica la ecuación (3.29) con $x_0 = 1/2$. En el último cuadro de la derecha se ha hecho $x_0 = x_r$. Se han tomado en cuenta el valor de los parámetros $D = 1$ y $b = 1$ en todos los casos.

hace aproximadamente un 14.44% más grande la zona donde el reinicio es benéfico para el proceso de búsqueda con respecto a \mathcal{D} , un 7.22% más amplio en cada sub-intervalo $(0, u_-)$ y $(u_+, 1)$ de \mathcal{D} .

En la Fig. 3.10 se ilustran curvas de acuerdo a la ecuación (3.29). En los cuadros a), b) y c) tenemos $x_0 \neq x_r$. Los arreglos para elaborar estos cuadros se hicieron tal que la zona en (3.41) sea la más amplia posible con $b = 1$ y $x_0 = 1/2$. Por otra parte, en el cuadro d) se ha hecho $x_0 = x_r$ y se han graficado tres curvas, de las cuales dos pertenecen a $\mathcal{D} = [(0, u_-) \cup (u_+, 1)]$ (curva azul y amarilla) y otra que no lo hace (curva verde). Esta curva verde en el cuadro d) tiene la misma posición de reinicio que aquella azul en el cuadro a), puede verse a simple vista que efectivamente el reinicio en a) produce un mínimo global en el TPC para alguna $r^* > 0$. Mientras que en el cuadro d) curva verde este no es el caso ya que $r^* = 0$, y por lo tanto emplear solamente difusión libre (sin reinicio) es una mejor estrategia de búsqueda. Cabe mencionar que si bien el reinicio con $x_0 \neq x_r$ amplía la zona \mathcal{D} de Pal y Prasad en [57], éste no necesariamente mejora el óptimo del tiempo promedio de captura. Es decir, el mínimo trivial para $r^* = 0$ de la curva verde en el cuadro d) es menor que aquel de la curva azul en el cuadro a) de la Fig. 3.10.

3.4.1. Posiciones iniciales distribuidas uniformemente

De manera similar a la sección 3.2.2 el tiempo promedio de captura en (3.29) se promedia sobre la posición inicial x_0 , sólo que en esta ocasión no para calcular las r^* , sino para calcular la diferencia que aparece en la desigualdad (3.35) y poder comparar con aquel de la sección anterior. La ecuación (3.29) promediada sobre x_0 distribuido uniformemente en el intervalo $[a, b]$ se escribe

$$\begin{aligned} \langle T_r \rangle_{x_0} &= \frac{1}{b-a} \int_a^b \langle T_r \rangle dx_0 = \frac{1}{b-a} \frac{\left[\int_a^b \sinh \alpha_0 (b-a) + \int_a^b \sinh \alpha_0 (x_0 - b) - \int_a^b \sinh \alpha_0 (x_0 - a) \right] dx_0}{r \sinh \alpha_0 (b - x_r) + r \sinh \alpha_0 (x_r - a)} \\ &= \frac{\left[\int_a^b \sinh \alpha_0 (b-a) dx_0 + \int_a^b \sinh \alpha_0 (x_0 - b) dx_0 - \int_a^b \sinh \alpha_0 (x_0 - a) dx_0 \right]}{(b-a) [r \sinh \alpha_0 (b - x_r) + r \sinh \alpha_0 (x_r - a)]} \end{aligned}$$

pero

$$\begin{aligned}\int_a^b \sinh \alpha_0 (x_0 - b) dx_0 &= \frac{1}{\alpha_0} \int \sinh y dy = \frac{1}{\alpha_0} \cosh \alpha_0 (x_0 - b) \Big|_a^b = \frac{1}{\alpha_0} - \frac{1}{\alpha_0} \cosh \alpha_0 (b - a) \\ \int_a^b \sinh \alpha_0 (x_0 - a) dx_0 &= \frac{1}{\alpha_0} \int \sinh z dz = \left[\frac{\cosh \alpha_0 (x_0 - a)}{\alpha_0} \right]_a^b = \frac{1}{\alpha_0} \cosh \alpha_0 (b - a) - \frac{1}{\alpha_0},\end{aligned}$$

por lo tanto

$$\langle T_r \rangle_{x_0} = \frac{\alpha_0 (b - a) \sinh \alpha_0 (b - a) + 2 [1 - \cosh \alpha_0 (b - a)]}{\alpha_0 (b - a) [r \sinh \alpha_0 (b - x_r) + r \sinh \alpha_0 (x_r - a)]}, \quad (3.42)$$

expresión que sólo depende de la tasa de reinicio y de las posiciones relativas de la posición de reinicio x_r con las dos paredes absorbentes.

Por otro lado es conveniente modificar el criterio (3.35), esto es cambiando la condición de $\frac{d\langle T_r \rangle}{dr} \Big|_{r \rightarrow 0} < 0$ a $\frac{d\langle T_r \rangle_{x_0}}{dr} \Big|_{r \rightarrow 0} < 0$, esto es equivalente a distribuir las posiciones iniciales usando precisamente la condición (3.35) de la siguiente manera

$$\frac{1}{b - a} \int_a^b \langle T_0^2(x_0) \rangle dx_0 - \frac{2 \langle T_0(x_r) \rangle}{b - a} \int_a^b dx_0 \langle T_0(x_0) \rangle > 0, \quad (3.43)$$

pero

$$\begin{aligned}\langle T_0 \rangle_{x_0} &= \frac{1}{b - a} \int_a^b dx_0 \langle T_0(x_0) \rangle = \frac{(b - a)^2}{12D}, \\ \langle T_0^2 \rangle_{x_0} &= \frac{1}{b - a} \int_a^b dx_0 \langle T_0^2(x_0) \rangle = \frac{(b - a)^4}{60D^2},\end{aligned}$$

por lo tanto sustituyendo estos últimos resultados de vuelta en (3.43) se tiene

$$\frac{(b - a)^4}{60D^2} - \frac{(b - x_r)(x_r - a)(b - a)^2}{12D^2} > 0,$$

o

$$\frac{(b - a)^2}{5} - (x_r - a)(b - x_r) > 0 \quad (3.44)$$

en donde se ha sustituido (3.36) evaluado en x_r dado que en (3.43) existe el factor $\langle T_0(x_r) \rangle$. La condición en (3.44), después de ser reducida algebraicamente haciendo $a = 0$ y posteriormente ser dividida por b^2 se reduce a una forma conocida en la literatura [57]

$$1 - 5u_r + 5u_r^2 > 0 \quad (3.45)$$

sólo que en lugar de ser $u_0 = \frac{x_0}{b}$, en (3.45) es $u_r = \frac{x_r}{b}$. Este resultado sugiere la equivalencia entre el sistema estudiado en [57] por Pal et al. donde $x_r = x_0$ y el sistema con $x_r \neq x_0$ y cuando x_0 se distribuye uniformemente en el intervalo $[a = 0, b]$.

Difusión con dos puntos de reinicio

4.1. Estado estacionario de no equilibrio

En el contexto de las estrategias de búsqueda en donde se busca minimizar el tiempo que le lleva a algún ente encontrar cierto objeto o en su caso otra entidad, es crucial el mecanismo que se emplea para poder hacerlo. En nuestro caso y como objeto de estudio se ha empleado el mecanismo de reinicio acoplado a una difusión unidimensional Browniana para diferentes sistemas donde puede existir la partícula o el ente: dos, una o ninguna pared absorbente. En tal o cual caso sólo se ha modificado el sistema espacial en cuestión y no el mecanismo de reinicio en sí. Es por esta razón que en esta sección se plantea modificar levemente este mecanismo agregando un segundo lugar a donde el ente o buscador puede reiniciar, ver Fig. 4.1.

Antecedentes de estudios donde se investigan procesos de primer arribo en los cuales existe más de un punto de reinicio han sido abordados en [8] por Martin y Satya donde consideran una distribución arbitraria para las posiciones de reinicio y también para las posiciones del blanco objetivo. Interesantemente, en el artículo [59] por Benjamin et. al. estudian el tiempo óptimo de primer captura (promedio) considerando una distribución Gaussiana para los sitios de reinicio cuando dos tipos de reinicio son tomados en cuenta: uno que es periódico y otro de tipo Poisson. Importante mencionar que esto los llevó a encontrar una *transición de fase* para el mínimo global en ambos tipos de reinicio, encontrando de esta manera un parámetro crítico b_c que caracteriza esta transición. Más recientemente, en el contexto de caminatas aleatorias discretas (en el tiempo), Fernanda et. al. en su artículo [60] estudiaron propiedades de primer arribo en redes con reinicio estocástico hacia múltiples nodos. Su estudio los llevó a encontrar expresiones analíticas para la probabilidad de ocupación en el caso estacionario y para el tiempo promedio de captura. Esto a su vez, les permitió evaluar la efectividad de las caminatas aleatorias para explorar redes cuando el mecanismo de reinicio está presente.

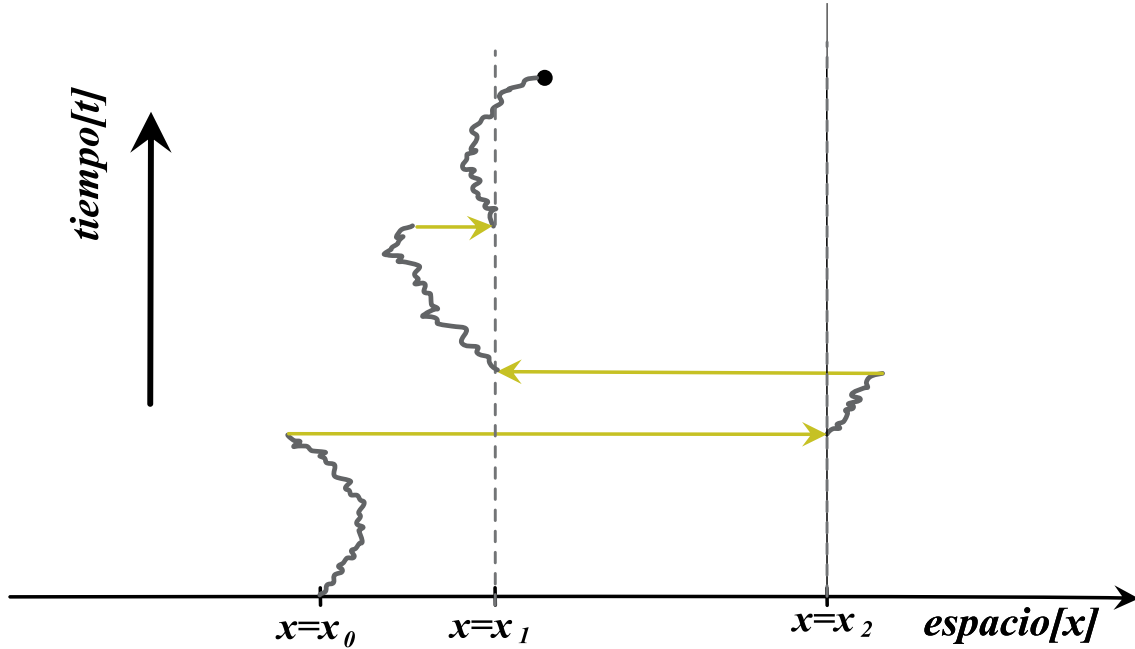


Figura 4.1: Partícula en difusión Browniana con dos puntos de reinicio en un medio unidimensional infinito. Aquí, la posición inicial x_0 es diferente de las posiciones de reinicio x_1 y x_2 .

En este capítulo se estudia el tiempo promedio de captura para el caso de una partícula Browniana con reinicio estocástico hacia dos sitios. Como se observará en un momento, la inclusión de un segundo sitio de reinicio a la dinámica (2.7) produce comportamientos muy interesantes y sorprendentes para las cantidades de primer arribo que se han venido manejando hasta ahora.

En el mismo espíritu que en el capítulo 2, escribamos las reglas de evolución en la dinámica para el problema en cuestión

$$x(t+dt) = \begin{cases} x_1 & \text{con probabilidad } r_1 dt \\ x_2 & \text{con probabilidad } p_2 = r_2 dt \\ x(t) + \eta(t) dt & \text{con probabilidad } p_0 = 1 - r_1 dt - r_2 dt \end{cases}$$

Como antes (ver sección 2.1) y de acuerdo a estas reglas de evolución para la posición final x , la probabilidad para que la partícula reinicie a x_1 después de exactamente $n+1$ pasos en el tiempo, cada uno de duración Δt ($t = n\Delta t$) es

$$\begin{aligned} p_{x_1} &= [1 - \Delta t (r_1 + r_2)] [1 - \Delta t (r_1 + r_2)] \dots [1 - \Delta t (r_1 + r_2)] r_1 \Delta t \\ &= [1 - \Delta t (r_1 + r_2)]^n r_1 \Delta t, \end{aligned}$$

tal que en el límite continuo $\Delta t \rightarrow 0$ la probabilidad es $P_{x_1}^{(t)} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} p_{x_1} = e^{-r_e t} r_1 dt$, esto es análogo para la probabilidad de reiniciar a x_2 : $P_{x_2}^{(t)} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} p_{x_2} = e^{-r_e t} r_2 dt$ donde r_e es la suma

de ambas tasa de reinicio

$$r_e = r_1 + r_2, \quad (4.1)$$

de aquí que la probabilidad para que el proceso no reinicie en el intervalo de tiempo $[0, t]$ es $P_0^{(t)} = e^{-r_e t}$.

Dado que se conoce P_{x_1} , P_{x_2} y P_{x_0} uno está en condiciones de poder escribir una ecuación de renovación que describa la evolución para la densidad de probabilidad $p_r(x, t|x_0, x_1, x_2)$ en el espacio libre, esto es sin ninguna pared absorbente tal y como se realizó en el capítulo 3. En total analogía y siguiendo la misma lógica que dio lugar a la ecuación (2.17) se escribe la ecuación de renovación de último reinicio para $x \in (-\infty, \infty)$

$$p_r(x, t|x_0, x_1, x_2) = e^{-r_e t} G_D(x, t|x_0) + r_1 \int_0^t d\tau e^{-r_e \tau} G_D(x, \tau|x_1) + r_2 \int_0^t d\tau e^{-r_e \tau} G_D(x, \tau|x_2), \quad (4.2)$$

en donde cada τ en cada una de las integrales corresponden al tiempo de último reinicio sucedido ya sea en x_1 o x_2 ; claro está a diferencia de (2.17) se agrega un término $r_2 \int_0^t d\tau e^{-r_e \tau} G_D(x, \tau|x_2)$ que toma en cuenta trayectorias de la partícula producidas a partir de haber reiniciado en el sitio x_2 . Como siempre, $G_D(x, t|x_0)$ es el propagador de difusión libre dado por (1.21). Desde la estructura en (4.2) no parece ser sorpresa que en el estado estacionario de no equilibrio ahora existan dos puntos modales: para calcular esta cantidad se hace $t \rightarrow \infty$ en la última ecuación

$$\begin{aligned} p_r(x|x_0, x_1, x_2) &= r_1 \int_0^\infty d\tau e^{-r_e \tau} G_D(x, \tau|x_1) + r_2 \int_0^\infty d\tau e^{-r_e \tau} G_D(x, \tau|x_2) \\ &= \frac{r_1}{\sqrt{4\pi D}} \int_0^\infty d\tau \tau^{-1/2} e^{-\frac{(x-x_1)^2}{4D\tau} - r_e \tau} + \frac{r_2}{\sqrt{4\pi D}} \int_0^\infty d\tau \tau^{-1/2} e^{-\frac{(x-x_2)^2}{4D\tau} - r_e \tau}, \end{aligned}$$

de acuerdo al resultado en (2.22) lo último efectivamente da como resultado

$$p_r(x|x_1, x_2) = \frac{1}{2} \frac{r_1}{\sqrt{(r_1 + r_2) D}} e^{-\alpha_0 |x-x_1|} + \frac{1}{2} \frac{r_2}{\sqrt{(r_1 + r_2) D}} e^{-\alpha_0 |x-x_2|}, \quad (4.3)$$

con $\alpha_0 = \sqrt{\frac{r_1+r_2}{D}}$ y donde el resultado muestra los dos puntos modales debido al mecanismo de reinicio en x_1 y x_2 . Como era de esperarse el efecto de agregar un segundo sitio de reinicio al problema se traduce en un segundo punto modal cuando $t \rightarrow \infty$, esto es porque ahora la partícula continuamente reinicia al segundo punto x_2 dejando que la densidad $p_r(x|x_1, x_2)$ sea alta en ese sitio. Obviamente las tasas de reinicio r_1 y r_2 juegan un papel importante porque modulan qué tan alta es la cúspide, ver Fig. 4.2. Entre mayor sean, mayor es la cúspide y por consiguiente cuando $t \rightarrow \infty$ será muy probable encontrar la partícula en estos sitios. Sin embargo en sitios $x \neq x_1, x_2$ la probabilidad de encontrar a la partícula decrece exponencialmente.

4.2. Una pared absorbente

El contenido de esta sección aborda el caso de un blanco absorbente en el origen de un medio semi-infinito, considerando que la partícula difusiva puede reiniciar a dos sitios diferentes entre sí y también distintos a los de su posición inicial en general. Ver por ejemplo Fig. 4.3

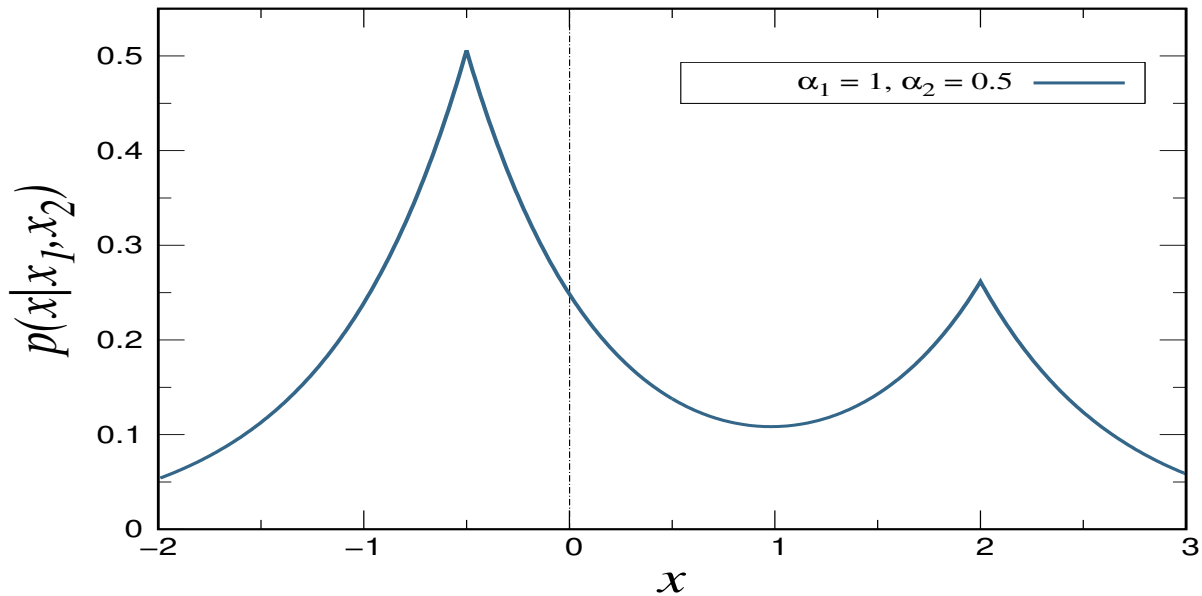


Figura 4.2: Las cantidades α_1 y α_2 se refieren a $\frac{r_1}{\sqrt{(r_1+r_2)D}}$ y $\frac{r_2}{\sqrt{(r_1+r_2)D}}$, respectivamente. En este caso $\alpha_1 > \alpha_2$ indica que hay una mayor tasa de reinicio hacia la posición x_1 y por ende existe una mayor probabilidad de encontrar a la partícula en ese sitio. $D = 1$.

En secciones pasadas hemos encontrado que el mecanismo de reinicio es benéfico para este sistema, siempre proporcionando una r^* que minimiza el proceso de llegada al blanco en función de la posición de reinicio. En este sentido resulta interesante pensar en cómo será el tiempo promedio de primer arribo en función de r_1 y r_2 ; ¿habrá algún punto extremo para esta cantidad? y por consiguiente ¿algún mínimo global?.

En vista de los antecedentes de capítulos anteriores resulta directo modificar las contribuciones a $S_r(t|x_0)$ incluir una segunda fuente de probabilidad a $S_r(t|x_0)$ en el contexto de las ecuaciones de renovación usando como punto de apoyo la ecuación (2.40). Ahora tenemos

$$S_r(t|x_0) = e^{-r_e t} S_0(t|x_0) + r_1 \int_0^t d\tau e^{-r_e \tau} S_0(\tau|x_1) S_r(t-\tau|x_0) + r_2 \int_0^t d\tau e^{-r_e \tau} S_0(\tau|x_2) S_r(t-\tau|x_0), \quad (4.4)$$

donde $S_0(t|x_0)$ es la probabilidad de supervivencia sin reinicio de la partícula libre en presencia de una pared absorbente y cuya transformada de Laplace está dada por (1.47). El primer término del lado derecho es la probabilidad de que la partícula sobreviva hasta el tiempo t partiendo desde la posición inicial x_0 sin un evento de reinicio. El segundo término, la partícula tiene probabilidad $r_1 d\tau$ de reiniciar a x_1 al tiempo $t - \tau$ y sigue libremente durante un intervalo de tiempo τ , durante el cual la probabilidad de no reiniciar es $e^{-r_e \tau}$, en lugar de $e^{-r_1 t}$ como anteriormente se escribía. Similarmente para el tercer término.

Prosiguiendo, es conveniente calcular la transformada de Laplace de (4.4)

$$q_r(s|x_0) = q_0(r_e + s|x_0) + r_1 q_0(r_e + s|x_1) q_r(s|x_0) + r_2 q_0(r_e + s|x_2) q_r(s|x_0),$$

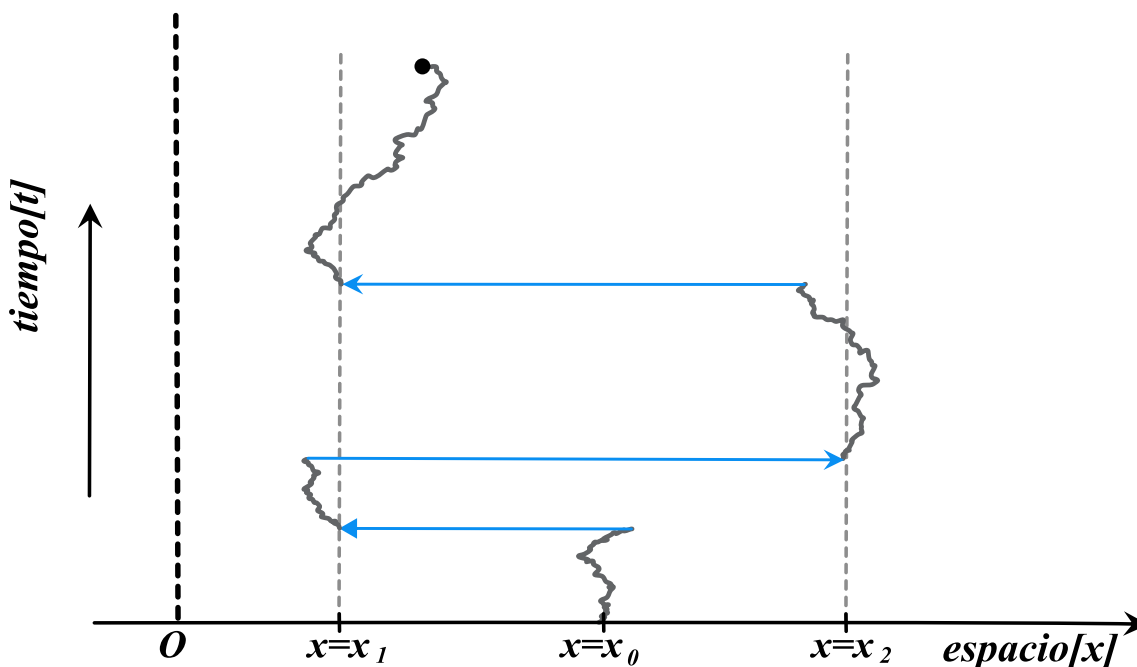


Figura 4.3: A la Fig. 4.1 se le agregó una pared absorbente situada en el origen.

y resolviendo para $q_r(s|x_0)$ concluimos en la expresión siguiente

$$q_r(s|x_0, x_1, x_2) = \frac{q_0(r_e + s|x_0)}{1 - r_1 q_0(r_e + s|x_1) - r_2 q_0(r_e + s|x_2)}. \quad (4.5)$$

Este resultado se reduce de manera inmediata a la ecuación (2.41) cuando hacemos $r_2 = 0$. Por lo tanto, en virtud de la transformada de Laplace y sus propiedades discutidas en el capítulo 2.1 el tiempo promedio de captura es calculado sustituyendo (1.47) en (4.5)

$$q_r(s|x_0, x_1, x_2) = \frac{1 - e^{-\sqrt{\frac{r_e+s}{D}}x_0}}{s + r_1 e^{-\sqrt{\frac{r_e+s}{D}}x_1} + r_2 e^{-\sqrt{\frac{r_e+s}{D}}x_2}}$$

y haciendo $s = 0$ se obtiene el tiempo promedio de primer arribo

$$\langle T_r \rangle(x_0, x_1, x_2) = \frac{1 - e^{-\alpha_0 x_0}}{r_1 e^{-\alpha_0 x_1} + r_2 e^{-\alpha_0 x_2}}, \quad (4.6)$$

con $\alpha_0 = \sqrt{\frac{r_e}{D}} = \sqrt{\frac{r_1+r_2}{D}}$. El resultado (4.6) puede dar pauta a conjeturar que en el caso de n puntos de reinicio, el tiempo promedio de captura será inversamente proporcional a la suma $\sum_{i=1}^n r_i e^{-\alpha_0 x_i}$ donde cada x_i son las posiciones de reinicio y $\alpha_0 = \sqrt{r_1 + r_2 + \dots + r_n/D}$.

4.2.1. Variables adimensionales en el tiempo promedio de captura

En vista del creciente número de parámetros (x_1, x_2, r_1, r_2, x_0 y D) resulta conveniente reducirlos a sólo unas pocas variables adimensionales que simplifiquen de manera significativa las expresiones encontradas hasta ahora.

De hecho, un cambio de variable adimensional muy sugerente y que surge de manera natural en (4.6) se puede apreciar si se multiplica y divide por x_1 los argumentos de las exponenciales

$$\langle T_r \rangle (x_0, x_1, x_r) = \frac{1 - e^{-\sqrt{\frac{r_1+r_2}{D}} x_1 \frac{x_0}{x_1}}}{r_1 e^{-\sqrt{\frac{r_1+r_2}{D}} \frac{x_1}{x_1} x_1} + r_2 e^{-\sqrt{\frac{r_1+r_2}{D}} x_1 \frac{x_2}{x_1}}},$$

pero

$$\sqrt{\frac{r_1+r_2}{D}} x_1 = \sqrt{\frac{r_1 x_1^2}{D} + \frac{r_2 x_1^2}{D}}.$$

Entonces si se definen

$$\tilde{r}_1 = \frac{r_1 x_1^2}{D} \quad \tilde{r}_2 = \frac{r_2 x_1^2}{D} \quad (4.7)$$

como las nuevas tasas de reinicio y

$$\tilde{x}_0 = \frac{x_0}{x_1}, \quad \tilde{x}_r = \frac{x_2}{x_1} \quad (4.8)$$

como las posiciones adimensionales para la condición inicial y el segundo punto de reinicio, el tiempo promedio en (4.6) puede ser reescrito como

$$\langle T_r \rangle (\tilde{r}_1, \tilde{r}_2, \tilde{x}_0, \tilde{x}_r) = \frac{1 - e^{-\tilde{\alpha}_0 \tilde{x}_0}}{\frac{D \tilde{r}_1}{x_1^2} e^{-\tilde{\alpha}_0} + \frac{D \tilde{r}_2}{x_1^2} e^{-\tilde{\alpha}_0 \tilde{x}_r}},$$

con $\tilde{\alpha}_0 = \sqrt{\tilde{r}_1 + \tilde{r}_2}$. La última ecuación para el tiempo $\langle T_r \rangle$ se puede expresar como una variable adimensional $\langle \tilde{T}_r \rangle$ multiplicada por un factor característico del sistema $T_0 = x_1^2/D$

$$\langle T_r \rangle (\tilde{r}_1, \tilde{r}_2, \tilde{x}_0, \tilde{x}_r) = T_0 \langle \tilde{T}_r \rangle,$$

por lo que implícitamente se ha definido una nueva variable adimensional \tilde{T}_r tal que

$$\langle \tilde{T}_r \rangle = \frac{\langle T_r \rangle (\tilde{r}_1, \tilde{r}_2, \tilde{x}_0, \tilde{x}_r)}{T_0} = \frac{1 - e^{-\sqrt{\tilde{r}_1 + \tilde{r}_2} \tilde{x}_0}}{\tilde{r}_1 e^{-\sqrt{\tilde{r}_1 + \tilde{r}_2}} + \tilde{r}_2 e^{-\sqrt{\tilde{r}_1 + \tilde{r}_2} \tilde{x}_r}}. \quad (4.9)$$

Con esta simplificación se han podido eliminar dos parámetros del TPC, a decir x_1 y D , de manera que los únicos parámetros involucrados en el estudio del TPC con una sola pared absorbente son las variables adimensionales $\tilde{r}_1, \tilde{r}_2, \tilde{x}_0, \tilde{x}_r$ incluidas en (4.9). Esta reducción es equivalente a escoger $D = 1$ y $x_1 = 1$, sin perder generalidad. También escogimos el punto x_1 como el más cercano al origen, es decir, a continuación, consideramos la segunda posición de reinicio $\tilde{x}_r \geq 1$, lo cual tampoco restringe la generalidad. Con base a esta ecuación se planteará extraer el comportamiento de las

tasas de reinicio óptimas, aquellas que hacen de \tilde{T}_r una cantidad mínima, ya que $\langle T_r \rangle (\tilde{r}_1, \tilde{r}_2, \tilde{x}_0, \tilde{x}_r)$ y $\langle \tilde{T}_r \rangle$ sólo están escaladas por un factor T_0 constante.

Las ecuaciones asociadas a posibles puntos mínimos de la función (4.9) se pueden calcular como sigue

$$\frac{\partial}{\partial r_1} \langle T_r \rangle (\tilde{r}_1, \tilde{r}_2, \tilde{x}_0, \tilde{x}_r) = T_0 \frac{\partial}{\partial r_1} \langle \tilde{T}_r \rangle (\tilde{r}_1, \tilde{r}_2) = T_0 \frac{\partial}{\partial \tilde{r}_1} \langle \tilde{T}_r \rangle (\tilde{r}_1, \tilde{r}_2) \frac{\partial \tilde{r}_1}{\partial r_1}$$

o

$$\frac{\partial}{\partial r_2} \langle T_r \rangle (\tilde{r}_1, \tilde{r}_2, \tilde{x}_0, \tilde{x}_r) = T_0 \frac{\partial}{\partial r_2} \langle \tilde{T}_r \rangle (\tilde{r}_1, \tilde{r}_2) = T_0 \frac{\partial}{\partial \tilde{r}_2} \langle \tilde{T}_r \rangle (\tilde{r}_1, \tilde{r}_2) \frac{\partial \tilde{r}_2}{\partial r_2},$$

sólo una de estas dos ecuaciones se puede cumplir a cabalidad, ya que como se verá a continuación, reduciremos el problema imponiendo una relación entre las dos tasas de reinicio r_1 y r_2 .

De acuerdo a las nuevas variables en (4.7), lo anterior es

$$\frac{\partial}{\partial r_1} \langle T_r \rangle (\tilde{r}_1, \tilde{r}_2, \tilde{x}_0, \tilde{x}_r) = T_0^2 \frac{\partial}{\partial \tilde{r}_1} \langle \tilde{T}_r \rangle (\tilde{r}_1, \tilde{r}_2, \tilde{x}_0, \tilde{x}_r)$$

o

$$\frac{\partial}{\partial r_2} \langle T_r \rangle (\tilde{r}_1, \tilde{r}_2, \tilde{x}_0, \tilde{x}_r) = T_0^2 \frac{\partial}{\partial \tilde{r}_2} \langle \tilde{T}_r \rangle (\tilde{r}_1, \tilde{r}_2, \tilde{x}_0, \tilde{x}_r).$$

Pero $\left. \frac{\partial \langle T_r \rangle}{\partial r_1} \right|_{r_1=r_1^*} = 0$ y $\left. \frac{\partial \langle T_r \rangle}{\partial r_2} \right|_{r_2=r_2^*} = 0$ implican que $\left. \frac{\partial \langle \tilde{T}_r \rangle}{\partial \tilde{r}_1} \right|_{\tilde{r}_1=\tilde{r}_1^*} = 0$ y $\left. \frac{\partial \langle \tilde{T}_r \rangle}{\partial \tilde{r}_2} \right|_{\tilde{r}_2=\tilde{r}_2^*} = 0$.

A continuación introducimos el parámetro m , definido por

$$\tilde{r}_2 = m\tilde{r}_1 = m \frac{r_1 x_1^2}{D}, \quad (4.10)$$

es decir, $m \in [0, \infty)$ representa el cociente entre la tasa de reinicio al punto más lejano del blanco y la tasa al punto más cercano. Obviamente el caso $m = 1$ da como resultado $\tilde{r}_2 = \tilde{r}_1$ y la partícula puede reiniciar en cualquiera de los dos sitios de reinicio con la misma probabilidad. Por otra parte si se considera $m \rightarrow 0$, el problema se convierte en aquel de un sólo sitio de reinicio. Con la definición (4.10) el TPC puede ser reescrito como

$$\langle \tilde{T}_r \rangle = \frac{\langle T_r \rangle (\tilde{r}_1, \tilde{r}_2, \tilde{x}_0, \tilde{x}_r)}{T_0} = \frac{1 - e^{-\tilde{\alpha}_0 \tilde{x}_0}}{\tilde{r}_1 (e^{-\tilde{\alpha}_0} + m e^{-\tilde{\alpha}_0 \tilde{x}_r})}.$$

Dado que sólo aparece explícitamente el parámetro \tilde{r}_1 se opta por simplificar la notación escribiendo

$$\langle \tilde{T}_r \rangle = \frac{1 - e^{-\tilde{\alpha}_0 \tilde{x}_0}}{\tilde{r} (e^{-\tilde{\alpha}_0} + m e^{-\tilde{\alpha}_0 \tilde{x}_r})} \quad (4.11)$$

donde se ha hecho $\tilde{r}_1 = \tilde{r}$, lo cual que implica $\tilde{\alpha}_0 = \sqrt{\tilde{r} (1 + m)}$.

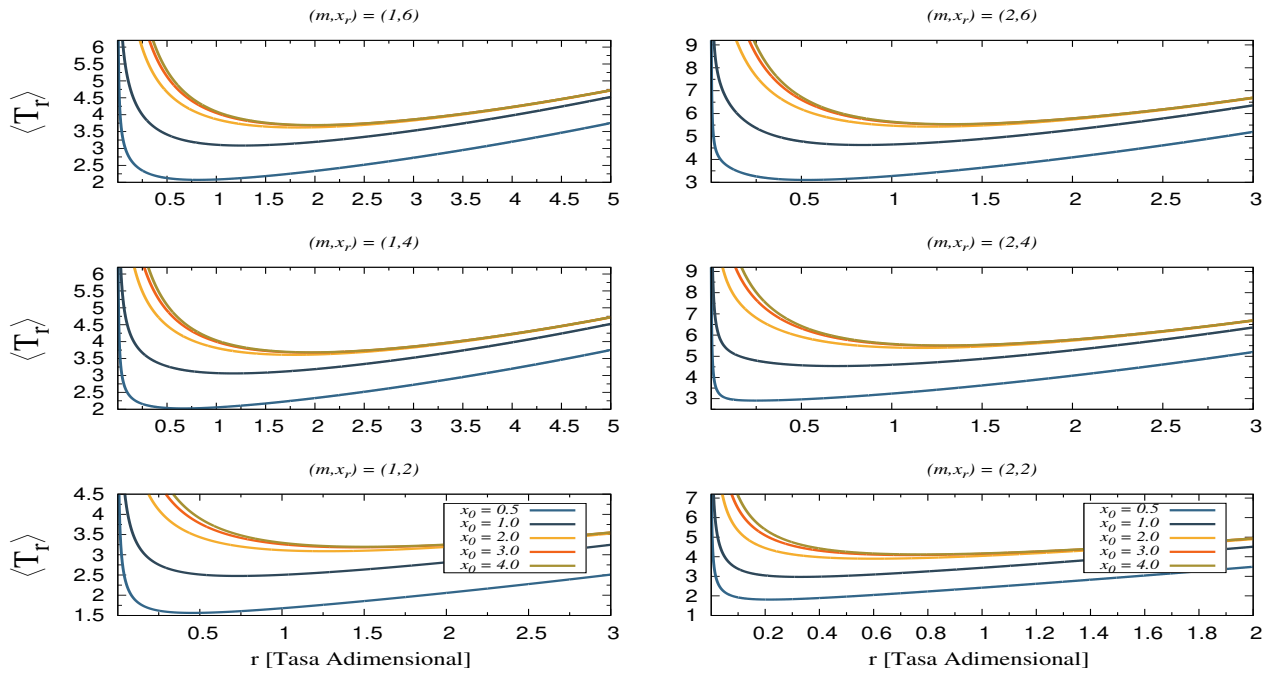


Figura 4.4: De izquierda a derecha se ilustran diferentes curvas de nivel para el TPC adimensional con $m = 1$ y $m = 2$, respectivamente. Los valores de la posición inicial son los mismos en cada cuadro, esto a diferencia de la posición de reinicio que toma los valores 2, 4 o 6 a según el cuadro en cuestión.

4.2.2. Optimización del tiempo promedio de captura a m fijo

A continuación estudiaremos (4.11) como función de \tilde{r} , fijando el parámetro m , y buscando minimizar el tiempo promedio en cuestión. También analizaremos el efecto que tienen las posiciones \tilde{x}_r y \tilde{x}_0 en la optimización de $\langle \tilde{T}_r \rangle$ a m fijo. A pesar de su simple apariencia, la expresión (4.11) tiene propiedades sorprendentes y poco triviales.

Como se puede apreciar de los ejemplos de la Fig. 4.4 al ser comparados con la Fig. 3.2, parece no haber un nuevo comportamiento por parte del tiempo promedio de captura con respecto a \tilde{r} cuando hay dos sitios de reinicio. Sin embargo, un comportamiento distinto al exhibido en la figura 4.4 se observa en 4.5, donde al menos para el caso de $m = 9$ las curvas para el TPC muestran un comportamiento interesante. En este caso, para $(m, \tilde{x}_r) = (9, 3)$ (cuadro inferior derecho de la figura 4.5) y variando x_0 observamos que sólo hay un mínimo global en el tiempo promedio de captura, justo como se había encontrado anteriormente para el caso de un sitio de reinicio. Sin embargo para el siguiente cuadro superior $(m, \tilde{x}_r) = (9, 3.8)$ se observa como esta cantidad llega a presentar un segundo mínimo local (o “metaestable”) para un valor más grande de \tilde{r} . Es decir, primero existe un mínimo global para una r_g^* y luego, conforme x_0 aumenta aparece uno local para alguna $\tilde{r}_l > \tilde{r}_g^*$. Posteriormente en esa misma figura (4.4) cuadro superior de la columna derecha, para una posición de reinicio $\tilde{x}_r = 4.6$ este primer mínimo global ha desaparecido mientras que el mínimo local se ha convertido en el global para alguna $\tilde{r}_l^* > \tilde{r}_g^*$. En la columna izquierda de la Fig.

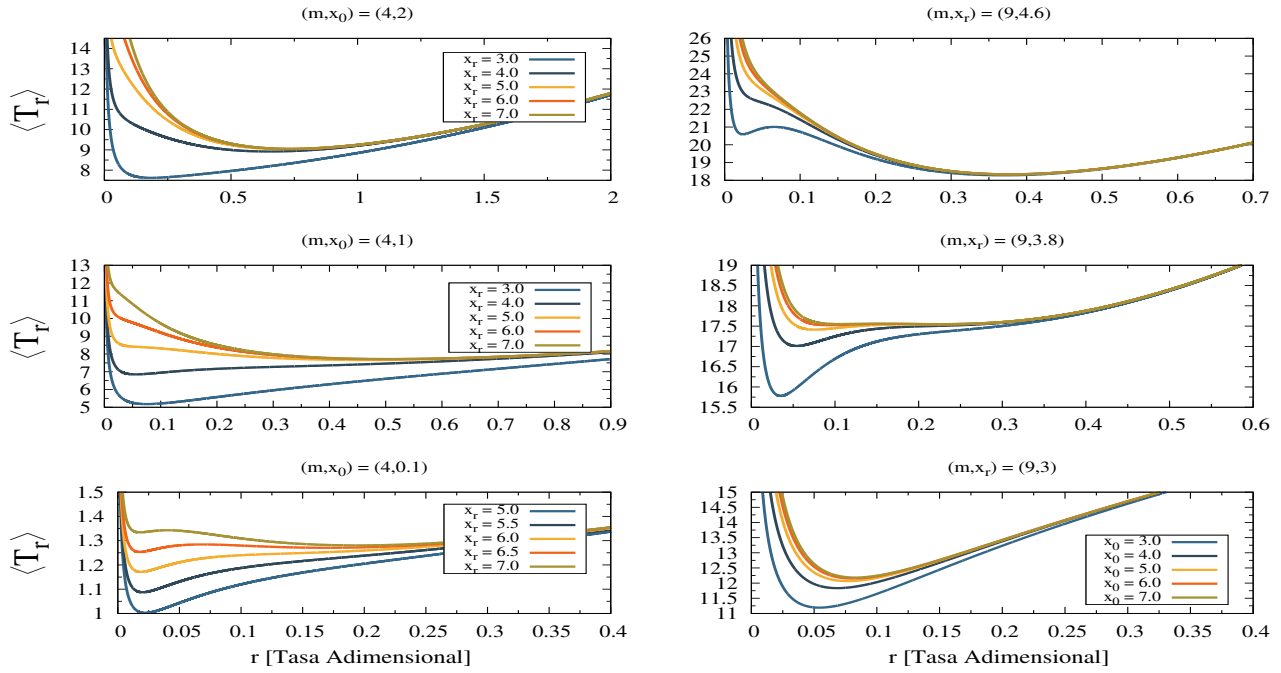


Figura 4.5: Se grafican diferentes tiempos promedio de encuentro como función de r , dados por la ecuación (4.11) con $m = 4$ y $m = 9$. En ambos valores del parámetro se han variado las posiciones x_0 y x_r tal que sea evidente el comportamiento del tiempo promedio de captura.

4.4, para $m = 4$ sucede este mismo comportamiento, cuando fijamos (m, \tilde{x}_0) y variamos \tilde{x}_r , primero existe un solo mínimo cuando $(m, \tilde{x}_0) = (4, 2)$ en alguna \tilde{r}^* , luego para $(m, \tilde{x}_0) = (4, 1)$ se puede llegar apreciar como a medida que la posición de reinicio asciende un segundo mínimo local aparece en una \tilde{r} mayor, tal que los nuevos mínimos locales se convierten en aquellos que son los globales.

En pocas palabras, el TPC tuvo un cambio discontinuo o una “transición” discontinua en el parámetro óptimo \tilde{r}^* , cuando se varía \tilde{x}_0 a \tilde{x}_r fijo, o viceversa (ver más adelante figuras 4.8 y 4.9). En otras palabras, a m fijo, existen duplas $(\tilde{x}_0, \tilde{x}_r)$ tales que los dos mínimos de $\langle \tilde{T}_r \rangle$ alcanzan exactamente el mismo valor, como se muestra en el recuadro a) de la Fig. 4.6. Un pequeño cambio en \tilde{x}_0 o \tilde{x}_r , produce que uno de estos mínimos baje y se vuelva absoluto. El comportamiento del tiempo óptimo $\langle \tilde{T}_r \rangle$ como función de \tilde{x}_0 o \tilde{x}_r se muestra en las figuras b) y c) de Fig. 4.6. Estos tiempos mínimos crecen en función de la posición correspondiente, hasta cierto punto no diferenciable (aquel punto en b) y c) de la figura 4.6 donde las curvas no son suaves) en el cual los dos mínimos son locales.

Ahora estudiemos cómo cambian las tasas óptimas en función de los parámetros \tilde{x}_0 y \tilde{x}_r . En consecuencia, optimicemos la ecuación (4.11):

$$\left[\frac{d}{dr} \langle \tilde{T}_r \rangle (\tilde{r}, \tilde{x}_0, \tilde{x}_r) \right]_{r=r^*} = T_0^2 \left[\frac{d}{d\tilde{r}} \langle \tilde{T}_r \rangle (\tilde{r}, \tilde{x}_0, \tilde{x}_r) \right]_{\tilde{r}=\tilde{r}^*} = 0.$$

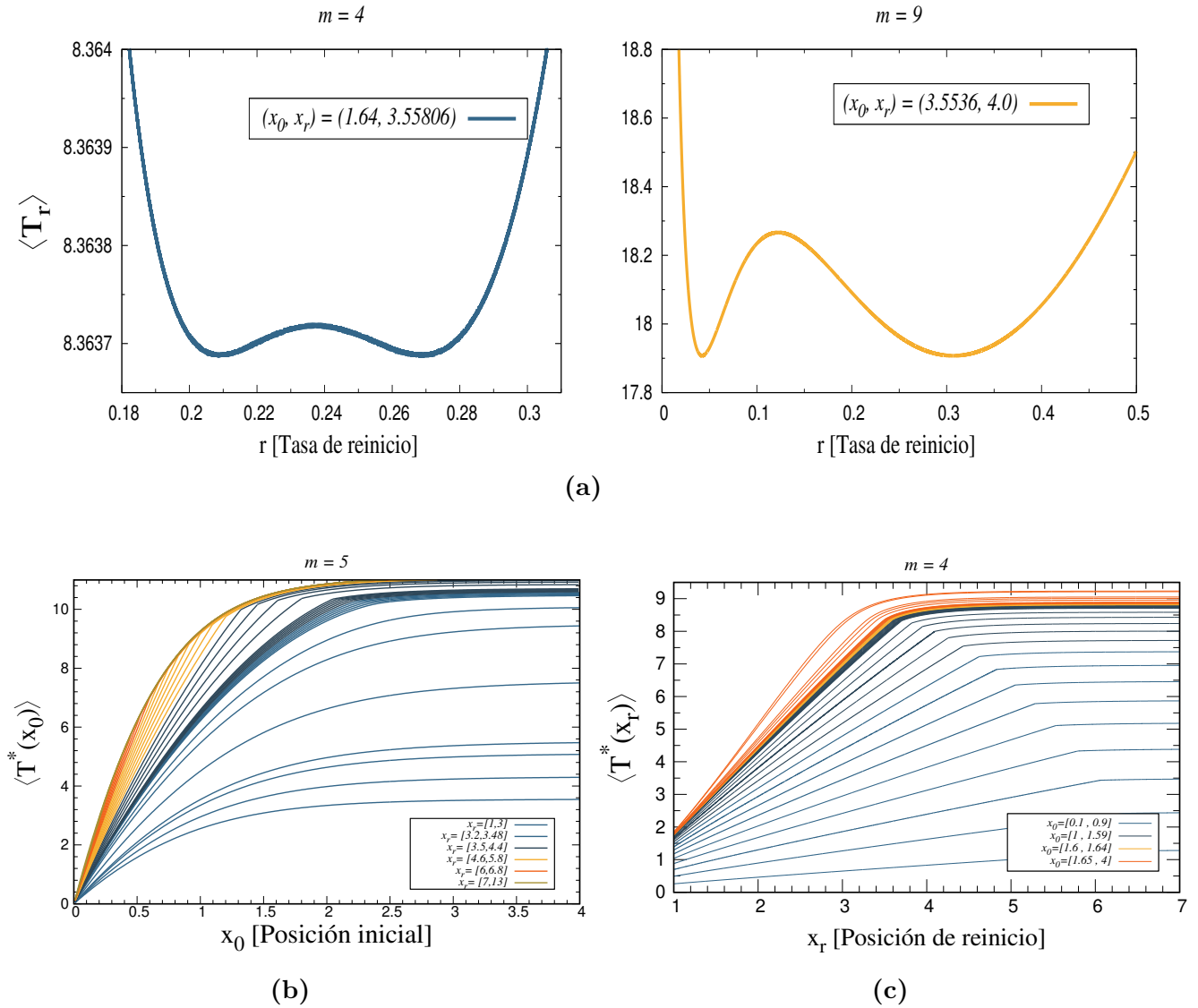


Figura 4.6: En a) se muestra la existencia de parámetros asociados al TPC en (4.11), tales que los que dos mínimos de $\langle \tilde{T}_r \rangle$ son ambos globales. Con una mínima alteración de \tilde{x}_r o \tilde{x}_0 produce un mínimo local y un mínimo global. b) y c) exhiben un punto no diferenciable cuando \tilde{x}_0 varía con \tilde{x}_r fijo (o viceversa, 4.6c). En el punto no diferenciable, los dos mínimos son ambos globales.

Además, la derivada de $\langle \tilde{T}_r \rangle$ con respecto a \tilde{r} es

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tilde{r}} \langle \tilde{T}_r \rangle (\tilde{r}, \tilde{x}_0, \tilde{x}_r) &= \frac{(\tilde{x}_0 (1+m) e^{-\tilde{\alpha}_0 \tilde{x}_0} / 2\tilde{\alpha}_0) (\tilde{r} (e^{-\tilde{\alpha}_0} + m e^{-\tilde{\alpha}_0 \tilde{x}_r}))}{[\tilde{r} (e^{-\tilde{\alpha}_0} + m e^{-\tilde{\alpha}_0 \tilde{x}_r})]^2} \\ &\quad - \frac{(e^{-\tilde{\alpha}_0} + m e^{-\tilde{\alpha}_0 \tilde{x}_r} + \tilde{r} (-(1+m) e^{-\tilde{\alpha}_0} / 2\tilde{\alpha}_0 - \tilde{x}_r m (1+m) e^{-\tilde{\alpha}_0 \tilde{x}_r} / 2\tilde{\alpha}_0))}{[\tilde{r} (e^{-\tilde{\alpha}_0} + m e^{-\tilde{\alpha}_0 \tilde{x}_r})]^2} \\ &\quad + \frac{e^{-\tilde{\alpha}_0 \tilde{x}_0} (e^{-\tilde{\alpha}_0} + m e^{-\tilde{\alpha}_0 \tilde{x}_r} + \tilde{r} (-(1+m) e^{-\tilde{\alpha}_0} / 2\tilde{\alpha}_0 - \tilde{x}_r m (1+m) e^{-\tilde{\alpha}_0 \tilde{x}_r} / 2\tilde{\alpha}_0))}{[\tilde{r} (e^{-\tilde{\alpha}_0} + m e^{-\tilde{\alpha}_0 \tilde{x}_r})]^2}, \end{aligned}$$

y se anula cuando

$$e^{-\tilde{\alpha}_0(1+\tilde{x}_0)} (\tilde{\alpha}_0\tilde{x}_0 - \tilde{\alpha}_0 + 2) + me^{-\tilde{\alpha}_0(\tilde{x}_r+\tilde{x}_0)} (\tilde{\alpha}_0\tilde{x}_0 - \tilde{\alpha}_0\tilde{x}_r + 2) + me^{-\tilde{\alpha}_0\tilde{x}_r} (\tilde{\alpha}_0\tilde{x}_r - 2) + e^{-\tilde{\alpha}_0} (\tilde{\alpha}_0 - 2) = 0 \quad (4.12)$$

Tal vez, una ecuación más sencilla de resolver será aquella cuando se toma el límite de $\tilde{x}_0 \rightarrow \infty$ que reduce significativamente la ecuación anterior

$$2\tilde{\alpha}_0 e^{-\tilde{\alpha}_0} + 2\tilde{\alpha}_0 m e^{-\tilde{\alpha}_0\tilde{x}_r} - \tilde{r}(1+m)e^{-\tilde{\alpha}_0} - \tilde{r}\tilde{x}_r m(1+m)e^{-\tilde{\alpha}_0\tilde{x}_r} = 0,$$

o escrito de una forma más compacta se puede llegar a la ecuación siguiente

$$e^{-\tilde{\alpha}_0} (2 - \tilde{\alpha}_0) = m e^{-\tilde{\alpha}_0\tilde{x}_r} (\tilde{x}_r\tilde{\alpha}_0 - 2),$$

y si se multiplica ambos lados de la ecuación por e^2 se tiene

$$e^{2-\tilde{\alpha}_0} (2 - \tilde{\alpha}_0) = m e^{-(\tilde{\alpha}_0\tilde{x}_r-2)} (\tilde{x}_r\tilde{\alpha}_0 - 2). \quad (4.13)$$

De igual manera, si $x_0 \rightarrow 0$ la ecuación correspondiente para \tilde{r}^* es

$$e^{-\tilde{\alpha}_0\tilde{x}_r}\tilde{r}m(1+m) - e^{-\tilde{\alpha}_0\tilde{x}_r}2\tilde{\alpha}_0^2m + e^{-\tilde{\alpha}_0\tilde{x}_r}\tilde{\alpha}_0\tilde{r}m\tilde{x}_r(1+m) + e^{-\tilde{\alpha}_0} [\tilde{r}(1+m) - 2\tilde{\alpha}_0^2 + \tilde{\alpha}_0\tilde{r}(1+m)] = 0,$$

es decir

$$e^{-\tilde{\alpha}_0} [-1 + \tilde{\alpha}_0] = m e^{-\tilde{\alpha}_0\tilde{x}_r} [1 - \tilde{\alpha}_0\tilde{x}_r],$$

si se multiplica por el número e en ambos lados de la ecuación se obtiene

$$e^{-(\tilde{\alpha}_0-1)} [\tilde{\alpha}_0 - 1] = m e^{-\tilde{\alpha}_0\tilde{x}_r+1} [-\tilde{\alpha}_0\tilde{x}_r + 1]. \quad (4.14)$$

En principio, no es posible resolver analíticamente las ecuaciones (4.13) y (4.14) (a menos que $m = 1$, en tal caso puede usarse la función de D’Lambert para obtener una ecuación analítica para \tilde{r}^* en función de los parámetros restantes) y tampoco la ecuación (4.12). Por tal motivo, y al igual que en secciones pasadas en la Fig. 4.7 se muestran soluciones numéricas obtenidas con *Mathematica* para \tilde{r}^* en función de \tilde{x}_0 dada una m y un valor \tilde{x}_r . Cabe destacar que en las figuras se ha obviado la tilde en los parámetros pertinentes y no se debe olvidar que corresponden a variables adimensionales las cuales provienen de la ecuación (4.11).

En las figuras a) y b) de Fig. 4.7, el valor de m es suficientemente “pequeño”: como se puede apreciar y en total similitud con secciones pasadas, la tasa de reinicio óptima que minimiza el tiempo promedio de captura siempre sigue un comportamiento creciente y continuo a medida que la posición inicial aumenta y tiende a un valor constante a partir de un cierto valor de \tilde{x}_0 , así que en este caso no existe un comportamiento discontinuo y el caso de dos sitios de reinicio se parece al de un solo sitio.

Sin embargo, la situación cambia cuando m es suficientemente grande, como se muestra en Fig. 4.8. Como se había mencionado anteriormente, el problema con dos sitios de reinicio resulta ser más rico e interesante de lo que parece a simple vista. La razón de esto es que por encima de cierto valor $m_c \approx 2.9029\dots$, el tiempo promedio de captura puede tener dos mínimos locales y una

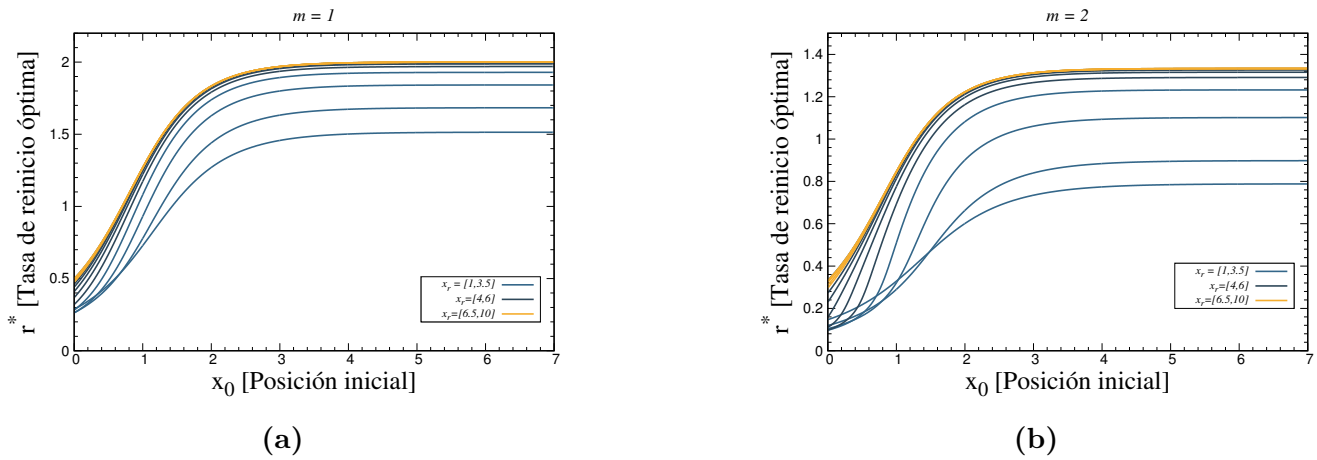


Figura 4.7: Tasas de reinicio óptimas en función de \tilde{x}_0 dada una \tilde{x}_r y una m a según resultados numéricos hechos en base a (4.11)

transición discontinua cuando el valor del TPC es el mismo en estos dos mínimos. Es decir, dada una $m > 2.902\dots$ y una cierta \tilde{x}_r ¹ existe una discontinuidad en la cantidad \tilde{r}^* cuando \tilde{x}_0 cruza cierto valor, tal y como se muestra en Fig. 4.6 y Fig. 4.8.

Juzgando cualitativamente las curvas a) y b) de la Fig. 4.8 junto con aquellas del inciso b) adjuntas en la Fig. 4.9, para una \tilde{x}_r dada, las discontinuidades aparecen a una cierta \tilde{x}_{0c} ² y conforme \tilde{x}_r aumenta, la magnitud de la discontinuidad \tilde{r}^* aumenta. Estas discontinuidades desaparecen (a una posición \tilde{x}_r suficientemente grande) dando lugar a una sola curva continua como se puede apreciar en las últimas líneas oscuras del inciso b) de la Fig. 4.9. Algo interesante de notar en la [Fig. 4.9b], es que por debajo de cierto valor crítico de \tilde{x}_r , es decir si $\tilde{x}_r < \tilde{x}_{rc}$, la discontinuidad desaparece y las variaciones de \tilde{r}^* con \tilde{x}_0 se vuelven suaves como en el caso de un solo sitio. Este valor crítico \tilde{x}_{rc} sólo depende de m . En resumen, si $\tilde{x}_r > \tilde{x}_{rc}$, se presenta una discontinuidad $\Delta\tilde{r}^* > 0$ (que es función de \tilde{x}_r) para cierto valor de transición \tilde{x}_{0t} (también dependiente de \tilde{x}_r). Mientras que si $\tilde{x}_r < \tilde{x}_{rc}$, no existe brinco o $\Delta\tilde{r}^* = 0$.

Una situación análoga se presenta en la Fig. 4.8c y Fig. 4.8d, cuando ahora se varía \tilde{x}_r , a \tilde{x}_0 fijo. La discontinuidad $\Delta\tilde{r}^* > 0$ en este caso se observa cuando \tilde{x}_0 es suficientemente pequeña, por debajo de un \tilde{x}_{0c} que depende de m . Para $\tilde{x}_0 > \tilde{x}_{0c}$, no hay discontinuidad y $\Delta\tilde{r}^* = 0$.

Estos hechos llevan a concluir que la transición de “fase” encontrada para la tasa de reinicio óptima es altamente dependiente de las posiciones \tilde{x}_0 y \tilde{x}_r , y el cociente m .

Debemos mencionar que cuando escogimos la “isoterma crítica” $\tilde{x}_r = \tilde{x}_{rc}$, la función $\tilde{r}^*(x_0)$ adquiere una pendiente vertical en el punto $\tilde{x}_0 = \tilde{x}_{0c}$. Ver Fig. 4.8b). Análogamente, intercambiando los papeles \tilde{x}_r y \tilde{x}_0 (ver figuras 4.8c, 4.8d), existe una curva crítica $\tilde{x}_0 = \tilde{x}_{0c}$, que adquiere una

¹Resaltar que no para cualquier \tilde{x}_r sucede este fenómeno, existe un rango de variación $\tilde{x}_r \in [\tilde{x}_r^i, \tilde{x}_r^f]$ tal que esta discontinuidad es un hecho.

²Por \tilde{x}_{0c} nos referimos a aquel valor para el cual aún no sucede la transición, pero cualquier minúscula variación en este parámetro provoca el cambio de “fase”.

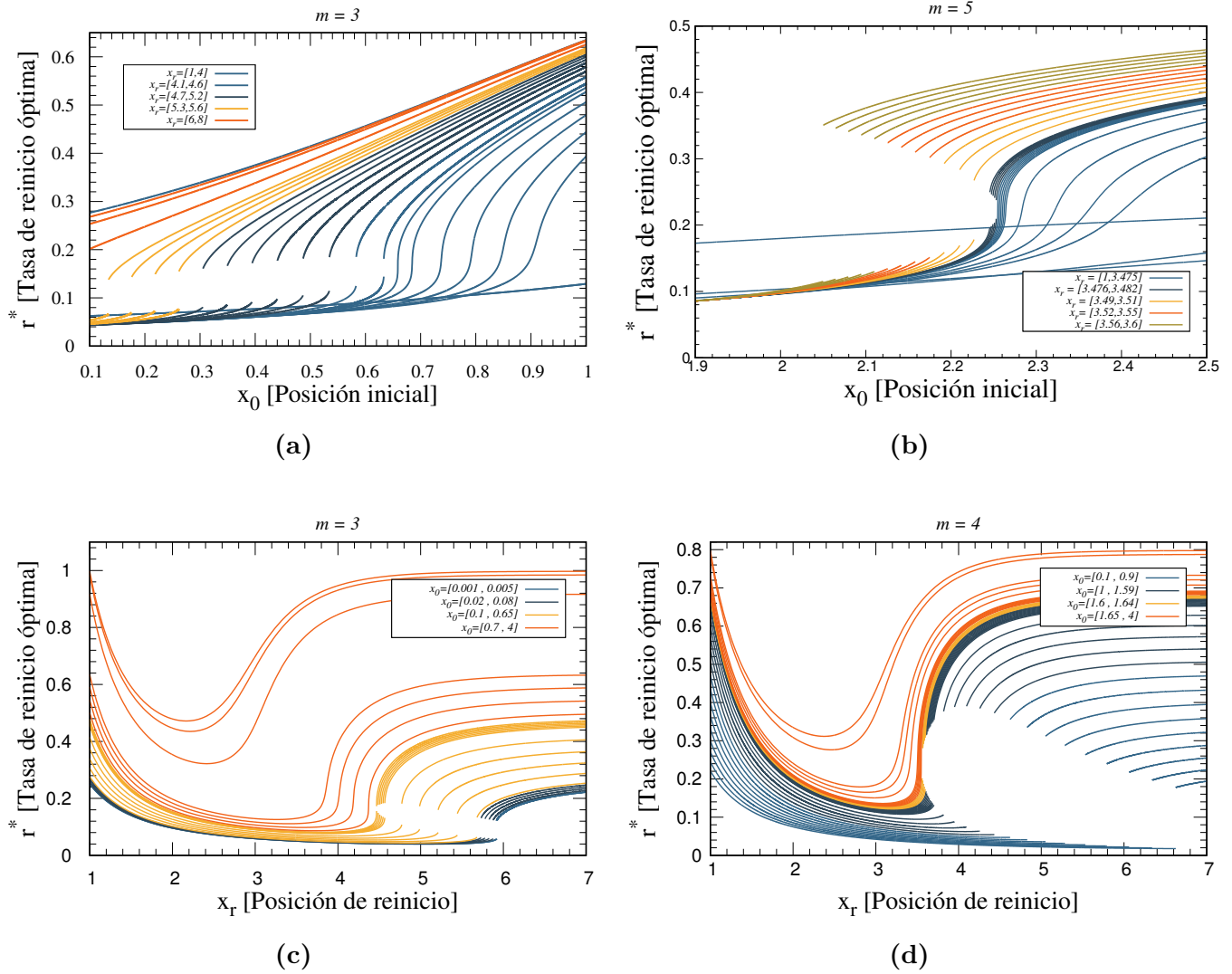


Figura 4.8: Existe una discontinuidad en las tasas de reinicio óptimas en función de x_0 cuando $m > 2.902$, en este caso se han dibujado curvas para $m = 3$ y $m = 5$ en la primera fila poniendo a r^* en función de \tilde{x}_0 . Por otra parte se ha hecho $m = 3, 4$ en la segunda fila poniendo a r^* como función de la posición de reinicio. Notar como en ambos casos de las figuras 4.8a y 4.8c la curva que da lugar a la transición tiene las mismas coordenadas críticas (x_{0c}, x_{rc}) .

pendiente vertical en $\tilde{x}_r = \tilde{x}_{rc}$. El punto (x_{0c}, x_{rc}) es el punto crítico de nuestro problema, y su posición en el plano (\tilde{x}_0, x_r) sólo depende de m . De ahora en adelante, el valor de \tilde{r}^* en ese punto se denotará como \tilde{r}_c .

Para terminar con esta descripción cualitativa, notamos otro fenómeno muy interesante en la Fig. 4.9a, donde el valor de m es más grande ($m = 9$) que en Fig. 4.9b ($m = 5$). En el caso de la figura 4.9a no parece existir alguna curva crítica, es decir, no existe algún punto crítico $(\tilde{x}_{0c}, \tilde{x}_{rc})$

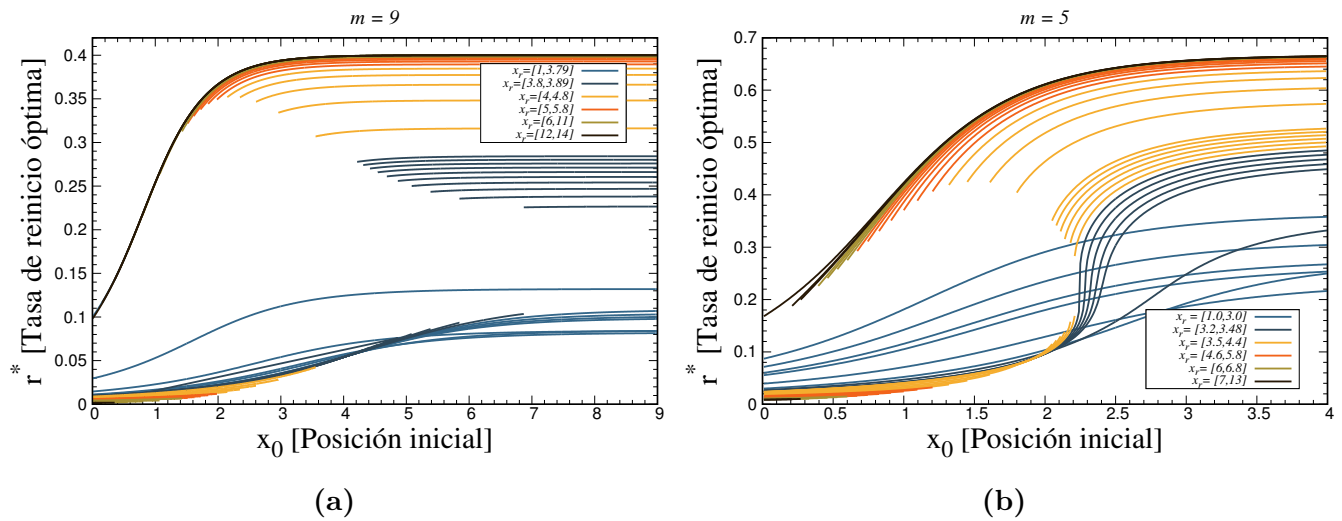


Figura 4.9: 4.9a A diferencia de curvas con $m < 8.56$ en $m = 9$ no parece existir una curva crítica. En esta ilustración se expone un rango más amplio de la [Fig. 4.8b] aunque con menos detalle en la zona de la transición.

como en Fig. 4.9b. Esta situación ocurre cuando $m > 8.56 \dots$. Por lo tanto, si $m > 8.56 \dots$, con \tilde{x}_r fijo dentro de cierto rango, ocurre una transición discontinua cuando \tilde{x}_0 cruza un valor de transición \tilde{x}_{0t} dependiente de \tilde{x}_r , pero no es posible identificar un punto crítico. Es decir $\tilde{x}_{0c} \rightarrow \infty$.

Para resumir, uno de los resultados principales de este análisis es que existe un punto crítico $(\tilde{x}_{0c}, \tilde{x}_{rc})$ solamente si $2.902 \dots < m < 8.560 \dots$. Veremos más adelante como calcular estos valores límites para m .

4.2.3. Aplicando teoría de Landau cerca del punto crítico

En su artículo [61], Pal y Prasad ya han desarrollado un estudio donde aplican la teoría de Landau a transiciones de fase vinculadas a sistemas con reinicio estocástico. En esta misma línea de pensamiento, a continuación proponemos una expansión tipo Landau para el tiempo promedio de captura cerca de la transición. Hacemos la identificación de \tilde{r}^* como el parámetro de “orden” característico de esta transición, tal que el tiempo promedio de captura en (4.11) cerca de la transición de “fase” se pueda expandir en términos de la diferencia de este parámetro y \tilde{r}_c , el valor crítico antes mencionado³. Esto es posible porque se asume que en esta región el tiempo promedio de supervivencia es continuo sin importar que \tilde{r} tome valores arbitrariamente pequeños cerca del punto crítico. Entonces en la vecindad de x_{rc} y x_{0c} (dada una m a la cual es posible observar este fenómeno) es posible realizar la expansión

$$\langle \tilde{T}_r \rangle (\tilde{r}, \tilde{x}_0, \tilde{x}_r) = \phi_0 + a_1(\tilde{r} - \tilde{r}_c) + a_2(\tilde{r} - \tilde{r}_c)^2 + a_3(\tilde{r} - \tilde{r}_c)^3 + a_4(\tilde{r} - \tilde{r}_c)^4 + \dots \quad (4.15)$$

³En la vecindad del punto crítico $(\tilde{x}_{0c}, \tilde{x}_{rc})$ y cuando $\tilde{x}_0 = \tilde{x}_{0t}$, \tilde{r}_c es aquel punto donde el TPC logra un máximo local, ver por ejemplo 4.6a en 4.6.

en donde ϕ_0 y los coeficientes $a_1, a_2, a_3, a_4 \dots$ son funciones de \tilde{x}_0 y \tilde{x}_r . A continuación consideramos \tilde{x}_0 como parámetro de control (de manera análoga a la temperatura en una transición de fase térmica).

Debido a la simetría mostrada por $\langle \tilde{T}_r \rangle(\tilde{r}, \tilde{x}_0, \tilde{x}_r)$ justo en el punto $\tilde{x}_0 = \tilde{x}_{0t}$ y $\tilde{x}_r = \tilde{x}_{rt}$ de la transición discontinua (ver por ejemplo el recuadro superior izquierdo de la figura 4.6a), sólo se tomarán potencias pares en (4.15). También exigimos que la diferencia $\Delta\tilde{r} = \tilde{r} - \tilde{r}_c$ sea muy pequeña, por lo tanto la expansión anterior se reescribe como

$$\langle \tilde{T}_r \rangle(\tilde{r}, \tilde{x}_{0t}, \tilde{x}_{rt}) \approx \phi_0 + a_2(\tilde{r} - \tilde{r}_c)^2 + a_4(\tilde{r} - \tilde{r}_c)^4, \quad (4.16)$$

en donde se han despreciado potencias sextas en adelante. Para aligerar la notación denotamos x_{0t} como \tilde{x}_0 y \tilde{x}_{rt} como \tilde{x}_r , siempre recordando que estamos en el punto de transición discontinua para \tilde{r} . La forma de $a_2(\tilde{x}_0)$ se escoge tal que cuando $\tilde{x}_0 \geq x_{0c}$ el tiempo promedio de captura se pueda minimizar sólo para $\tilde{r}^* = \tilde{r}_c$ (no olvidar que estamos haciendo la expansión alrededor del valor crítico \tilde{r}_c , es decir se ha trasladado el origen) y cuando $x_0 < x_{0c}$ sólo sea minimizado para $\tilde{r}^* \neq \tilde{r}_c$. Además, como sabemos, el tiempo promedio de captura es mínimo si $\left. \frac{\partial \langle \tilde{T}_r \rangle}{\partial \tilde{r}} \right|_{\tilde{r}=\tilde{r}^*} = 0$ y $\left. \frac{\partial^2 \langle \tilde{T}_r \rangle}{\partial \tilde{r}^2} \right|_{\tilde{r}=\tilde{r}^*} > 0$. Si se escoge $a_2(\tilde{x}_0) > 0$ para $\tilde{x}_0 > \tilde{x}_{0c}$, y $a_2(\tilde{x}_0) < 0$ para $\tilde{x}_0 < \tilde{x}_{0c}$, efectivamente se obtiene $\tilde{r}^* = \tilde{r}_c$ para $\tilde{x}_0 > \tilde{x}_{0c}$ mientras que $\tilde{r}^* \neq \tilde{r}_c$ para $\tilde{x}_0 < \tilde{x}_{0c}$.

Otra observación importante es que el TPC debe ser continuo en el punto $(\tilde{x}_{0c}, \tilde{x}_{rc})$ por lo que $a_2(\tilde{x}_{0c}, \tilde{x}_{rc}) = 0$. Estas condiciones pueden cumplirse si tomamos la forma funcional más sencilla para $a_2(\tilde{x}_0)$, es decir, una forma funcional lineal:

$$a_2(\tilde{x}_0) = a_0(\tilde{x}_0 - \tilde{x}_{0c}), \quad (4.17)$$

con a_0 una constante positiva $a_0 > 0$. La constante $a_4(\tilde{x}_0)$ debe ser siempre positiva para asegurar que el TPC crezca a medida que \tilde{r} aumenta. Por lo tanto $a_4(\tilde{x}_0) \simeq a_4(\tilde{x}_{0c})$ a primer orden. El TPC tiene sus puntos extremos \tilde{r}^* cuando

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \langle \tilde{T}_r \rangle(\tilde{r}, \tilde{x}_0, \tilde{x}_r)}{\partial \tilde{r}} \right|_{\tilde{r}=\tilde{r}^*} &= 2a_2(\tilde{r}^* - \tilde{r}_c) + 4a_4(\tilde{r}^* - \tilde{r}_c)^3 = 0 \\ (\tilde{r}^* - \tilde{r}_c) \left(2a_2 + 4a_4(\tilde{r}^* - \tilde{r}_c)^2 \right) &= 0, \end{aligned}$$

proporcionando como resultado tres posibles soluciones: $\tilde{r}^* = \tilde{r}_c$ ó $\tilde{r}^* - \tilde{r}_c = \pm \sqrt{\frac{-a_2}{2a_4}}$ cuando a_2 es menor que cero, en tal caso los mínimos ocurren para $\pm \sqrt{\frac{-a_2}{2a_4}}$, esto significa que para posiciones \tilde{x}_0 menores que las críticas existen dos tasas de reinicio óptimas, simétricas con respecto a \tilde{r}_c y separadas por

$$\Delta r^*(\tilde{x}_0) = \tilde{r}^* - \tilde{r}_c = \pm \sqrt{\frac{a_0(\tilde{x}_{0c} - \tilde{x}_0)}{2a_4}}, \quad (4.18)$$

cuyo hecho nos lleva a concluir que $\Delta r^*(\tilde{x}_0) \sim (\tilde{x}_0 - \tilde{x}_{0c})^{\frac{1}{2}}$, es decir nuestra transición de fase lleva como exponente crítico $\beta = \frac{1}{2}$. Como apoyo ilustrativo a la reciente exposición así como sustento a la ecuación (4.18) se ha incluido la Fig. 4.10 donde por comodidad se han insertado las curvas de \tilde{x}_0 como función de las tasas de reinicio \tilde{r}^* .

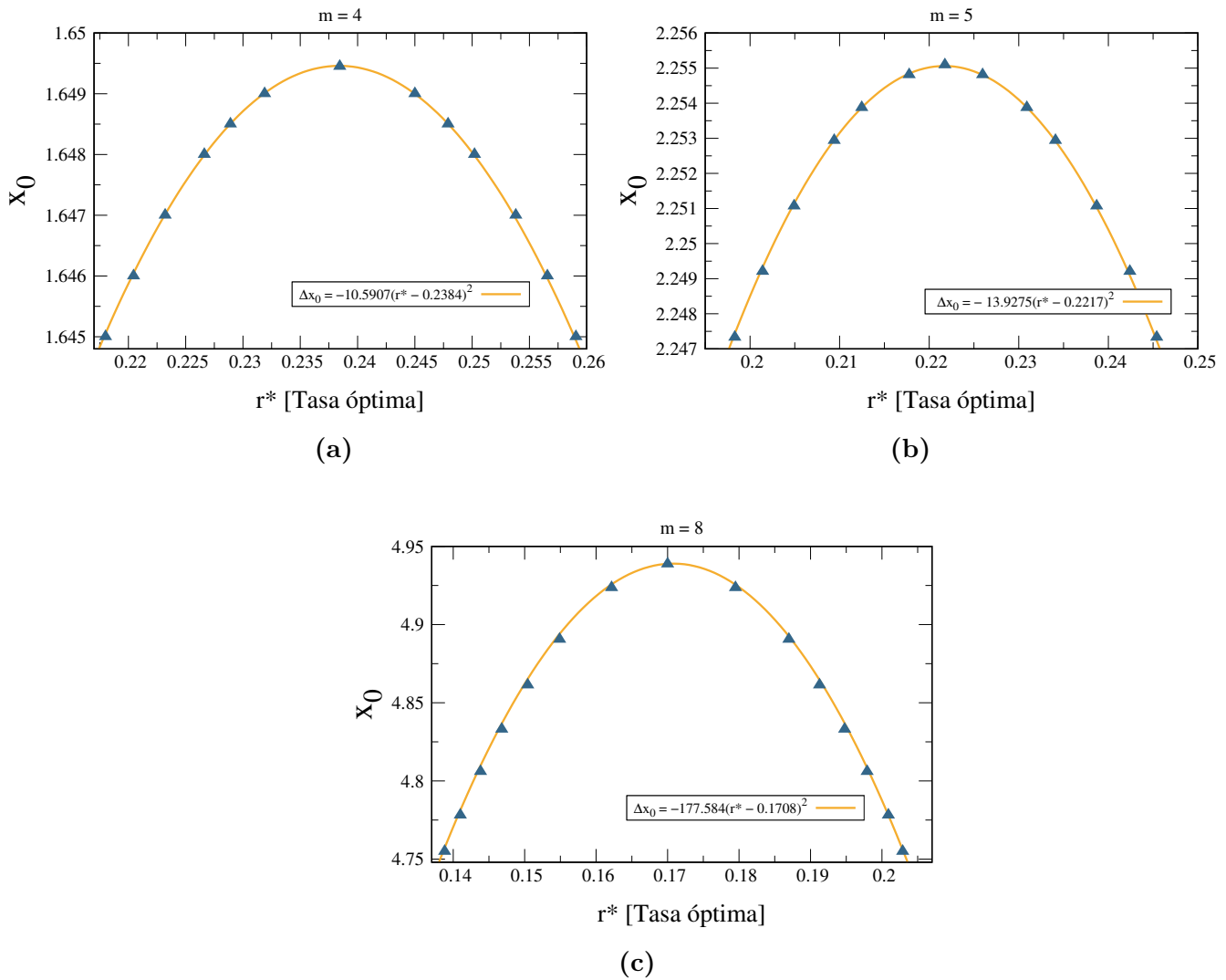


Figura 4.10: En cada una de las gráficas (en las cuales por comodidad se ha obviado la tilde) se ajustó un polinomio de orden cuadrático (la expresión del polinomio aparece en la leyenda de cada gráfica). Cada polinomio se ajusta muy bien a puntos cerca de la transición de fase demostrando que el exponente crítico es $\beta = 1/2$. En $m = 4, 5, 8$ se encontraron las posiciones críticas $x_{0c} = 1.6494, 2.255$ y $x_{0c} = 4.9389$ donde $\Delta x_0 = x_0 - x_{0c}$.

Las gráficas que constituyen esta figura fueron elaboradas calculando numéricamente los mínimos más cercanos al punto crítico ($\tilde{x}_{0c}, \tilde{r}_c$). De hecho se puede llegar apreciar como la posición \tilde{x}_0 en el eje vertical varía muy levemente. De aquí que la expansión en (4.16) sea completamente válida y los términos de orden superior puedan ser despreciados. En cada una de estas gráficas para $m = 4, 5, 8$ se hizo un ajuste polinomial hasta orden cuadrático (línea naranja sólida) la cual coincide en buena manera con los datos recabados numéricamente. Es menester poner especial atención en el caso

$m = 8$ porque si bien los casos $m = 4$ y 5 ajustan perfectamente con su respectiva curva éste lo hace casi perfectamente. Una posible explicación de estas leves discrepancias es porque, como ya se comentó arriba, conforme el parámetro m escala hasta una $m_c \approx 8.5603\dots$ la curva crítica desde la cual empieza la transición es inexistente u ocurre para posiciones iniciales cada vez más grandes. Por esto mismo se considera la posibilidad de que en $m = 8$, el punto desde el cual abre la parábola en Fig. 4.10c ya se haya corrido hacia posiciones \tilde{x}_0 mayores desembocando en que el ajuste no sea perfecto para todos los puntos cerca de esta transición y que la teoría expuesta arriba ya no sea adecuada para valores $m > 8$.

4.2.4. Cota inferior y superior del factor de reescalamiento

Es posible calcular y por consiguiente refinar (de manera numérica, al menos) los valores para las cotas superior e inferior de m . Como primer paso debemos recordar, de la ecuación (4.11), que dado un valor m fijo tal que $2.9029 \leq m \leq 8.5603$ existe un conjunto $(\tilde{x}_0, \tilde{x}_r)$ que da como resultado una “coexistencia” de mínimos globales simétrica como aquella que se muestran en la Fig. 4.6a, curva azul. Este aspecto es muy importante en la determinación de las cotas m_c . Esto es debido a que cuando los dos mínimos globales presentes en la curva de transición $(\tilde{x}_{0t}, \tilde{x}_{rt})$ coalescen (ya sea porque \tilde{x}_0 aumenta o porque x_r disminuye, ver figura 4.8), producen una región “plana” en la vecindad del punto crítico, ver [Fig. 4.11]. De aquí que podamos construir un sistema de ecuaciones definido tal que las tres primeras derivadas de $\langle \tilde{T}_r \rangle$ con respecto a \tilde{r} en (4.11) se anulen en este punto

$$\begin{aligned} \left. \frac{d\langle \tilde{T}_r \rangle}{d\tilde{r}} \right|_{(\tilde{r}, \tilde{x}_0, \tilde{x}_r) = (\tilde{r}_c, \tilde{x}_{0c}, \tilde{x}_{rc})} &= 0 \\ \left. \frac{d^2\langle \tilde{T}_r \rangle}{d\tilde{r}^2} \right|_{(\tilde{r}, \tilde{x}_0, \tilde{x}_r) = (\tilde{r}_c, \tilde{x}_{0c}, \tilde{x}_{rc})} &= 0 \\ \left. \frac{d^3\langle \tilde{T}_r \rangle}{d\tilde{r}^3} \right|_{(\tilde{r}, \tilde{x}_0, \tilde{x}_r) = (\tilde{r}_c, \tilde{x}_{0c}, \tilde{x}_{rc})} &= 0. \end{aligned} \quad (4.19)$$

En principio, si no existe un punto $(\tilde{r}_c, \tilde{x}_{0c}, \tilde{x}_{rc})$ que satisfaga este sistema dada una m fija, entonces es imposible para el TPC en (4.11) tener una curva de transición (como aquellas en la Fig. 4.6a) que se defina en el punto (x_{0t}, x_{rt}, m) . Luego, uno puede ir fijando la constante m y verificar que el sistema de ecuaciones anterior tenga solución única.

Finalmente, para minimizar posibles fluctuaciones en el resultado debido a la estructura funcional de $\langle \tilde{T}_r \rangle$ en función de \tilde{r} hemos ocupado el cambio de variable

$$y = e^{\tilde{\alpha}_0} \quad (4.20)$$

que da como resultado

$$\langle \tilde{T}_r(y) \rangle = \frac{(1+m)(y^{\tilde{x}_r} - y^{\tilde{x}_r - \tilde{x}_0})}{[\ln y]^2 (y^{x_r - 1} + m)}. \quad (4.21)$$

De (4.20) es claro que una vez encontrada la triada (y_c, x_{0t}, x_{rt}) que satisface el sistema (4.19) entonces la tasa de reinicio donde ocurre el máximo local es

$$\tilde{r}_c = \frac{[\ln y_c]^2}{1+m}. \quad (4.22)$$

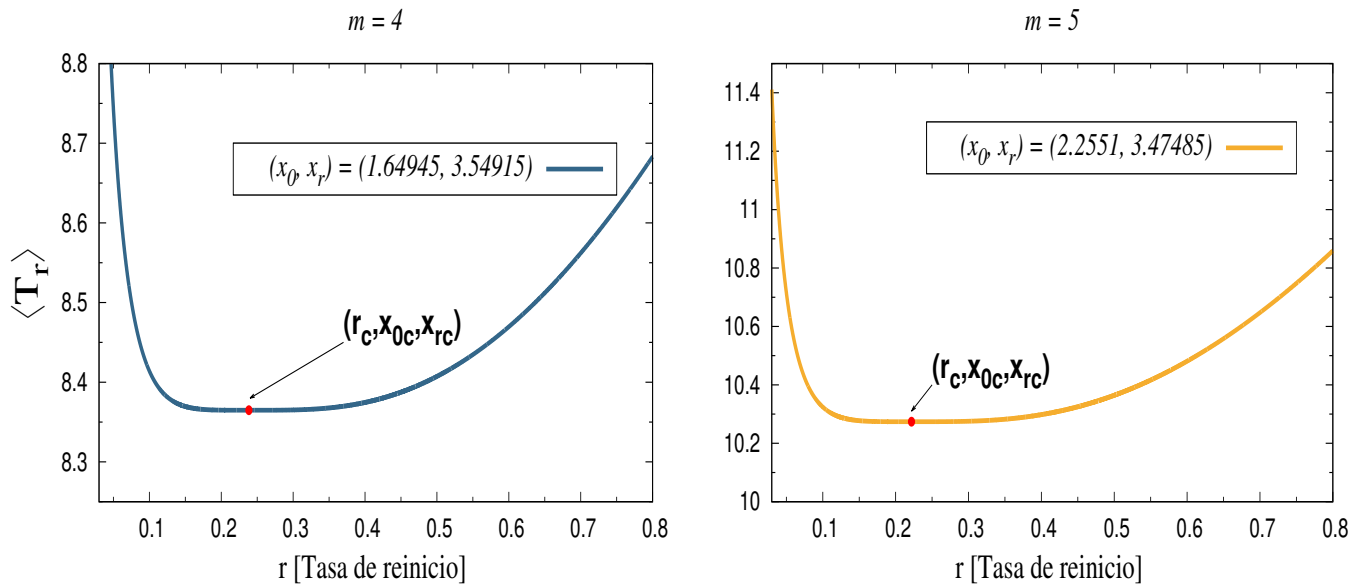


Figura 4.11: Se ilustran las curvas críticas de $\langle \tilde{T}_r \rangle$ en función de \tilde{r} para dos valores diferentes de m con $2.9029 \leq m \leq 8.5603$. En ellas se ha incluido el punto crítico (r_c, x_{0c}, x_{rc}) donde las tres primeras derivadas del TPC se anulan. Notar como en la vecindad de este punto el comportamiento del TPC en función de la tasa de reinicio adimensional es a grandes rasgos, constante. Los valores para las posiciones inicial y de reinicio que aparecen en los recuadros de cada curva son los valores x_{0c} y x_{rc} .

Cabe aclarar que también es posible resolver el sistema (4.19) usando directamente la ecuación (4.11).

4.3. Dos paredes absorbentes: Tiempo Promedio de Captura

Como primer acercamiento al problema de encontrar el tiempo promedio de captura para una partícula dentro de dos paredes absorbentes con dos sitios de reinicio se plantea la ecuación de Fokker-Planck correspondiente, ya que resulta natural agregar una fuente de probabilidad a la evolución temporal de la probabilidad de supervivencia, así como también un sumidero a ésta al tiempo t

$$\frac{\partial S_r(t|x_0, x_1, x_2)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 S_r(t|x_0, x_1, x_2)}{\partial x_0^2} + r_1 S_r(t|x_1) - r_1 S_r(t|x_0, x_1, x_2) + r_2 S_r(t|x_2) - r_2 S_r(t|x_0, x_1, x_2) \quad (4.23)$$

donde a comparación con el sistema de un sólo sitio de reinicio ahora la evolución temporal para $S_r(t|x_0, x_1, x_2)$ toma en cuenta el segundo sitio de reinicio. Esto es, se acepta que al tiempo t la

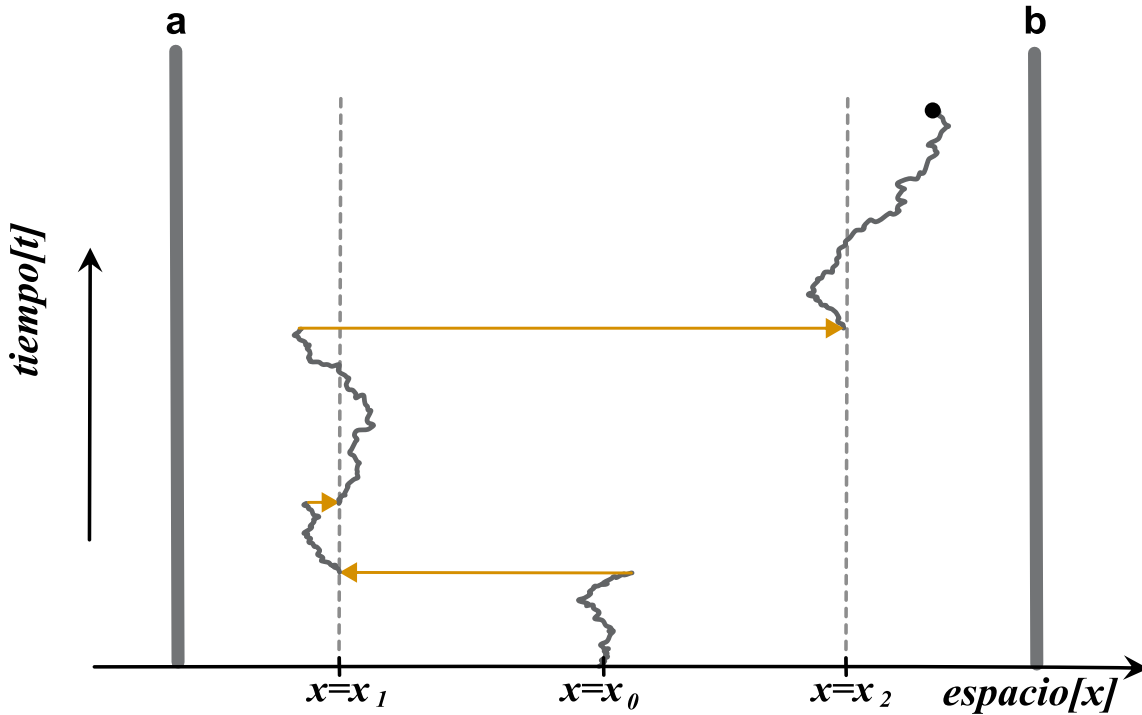


Figura 4.12: Partícula en difusión Browniana con dos puntos de reinicio confinada entre dos paredes absorbentes. a y b son las posiciones de las paredes absorbentes.

partícula que empezó en x_0 desaparezca y reinicie de nuevo en el sitio de reinicio $x = x_2$. Las condiciones a la frontera siguen siendo las mismas $S_r(t|x_0 = a, x_1, x_2) = S_r(t|x_0 = b, x_1, x_2) = 0$. El método de solución es el mismo que aquel que se utilizó para resolver la ecuación (4.23). Se aplica la transformada de Laplace

$$q_r(s|x_0, x_1, x_2) = \int_0^\infty dt e^{-rt} S_r(t|x_0, x_1, x_2)$$

para obtener una ecuación muy familiar

$$D \frac{\partial^2 q_r(s|x_0, x_1, x_2)}{\partial x_0^2} - (r_1 + r_2 + s) q_r(s|x_0, x_1, x_2) = -1 - r_1 q_r(s|x_1) - r_2 q_r(s|x_2), \quad (4.24)$$

cuya solución puede ser encontrada relativamente fácil proponiendo $q_r(s|x_0, x_1, x_2) = q_{rh}(s|x_0, x_1, x_2) + C$, donde $q_{rh}(s|x_0, x_1, x_2)$ es la solución asociada a la ecuación homogénea de (4.24)

$$q_{rh}(s|x_0, x_1, x_2) = A \sinh \alpha x_0 + B \cosh \alpha x_0$$

y C es una constante que da cuenta de la parte no homogénea de la ecuación, α se ha definido como $\alpha = \sqrt{(r_1 + r_2 + s)/D}$. Al imponer las condiciones de frontera uno puede encontrar que la

solución toma la forma

$$q_r(s|x_0, x_1, x_2) = A(\sinh \alpha x_0 - \sinh \alpha a) + A \frac{(\sinh \alpha a - \sinh \alpha b)}{\cosh \alpha b - \cosh \alpha a} (\cosh \alpha x_0 - \cosh \alpha a), \quad (4.25)$$

dónde la constante A puede ser calculada si se sustituye (4.25) de vuelta en (4.23). Esto da como resultado la solución esperada para $q_r(s|x_0, x_1, x_2)$

$$q_r(s|x_0, x_1, x_2) = \frac{\sinh \alpha (b - a) - \sinh \alpha (b - x_0) - \sinh \alpha (x_0 - a)}{s \sinh \alpha (b - a) + (r_1 + r_2) [\sinh \alpha (b - x_1) + \sinh \alpha (x_1 - a)]}. \quad (4.26)$$

El tiempo promedio de captura se sigue de inmediato al hacer $s \rightarrow 0$ en la última ecuación

$$\langle T_r \rangle (x_0, x_1, x_2) = \frac{\sinh \alpha_0 (b - a) - \sinh \alpha_0 (b - x_0) - \sinh \alpha_0 (x_0 - a)}{r_1 [\sinh \alpha_0 (b - x_1) + \sinh \alpha_0 (x_1 - a)] + r_2 [\sinh \alpha_0 (b - x_2) + \sinh \alpha_0 (x_2 - a)]}, \quad (4.27)$$

dónde α_0 ahora es $\alpha_0 = \sqrt{(r_1 + r_2)/D}$. Notar como las diferentes tasas de reinicio r_1 y r_2 afectan directamente sólo a términos que contengan la información del reinicio sobre las posiciones x_1 y x_2 .

Podemos corroborar que la ecuación (4.27) se reduce al caso de una pared absorbente si hacemos $b \rightarrow \infty$ despreciando los términos que no contengan b frente a los que sí, en este límite el TPC obtenido se puede aproximar como

$$\begin{aligned} \lim_{b \rightarrow \infty} \langle T_r \rangle (x_0, x_1, x_2) &= \lim_{b \rightarrow \infty} \frac{\sinh \alpha_0 (b - a) + \sinh \alpha_0 (x_0 - b)}{r_1 \sinh \alpha_0 (b - x_1) + r_2 \sinh \alpha_0 (b - x_2)} \\ &= \lim_{b \rightarrow \infty} \frac{e^{\alpha_0(x_0-b)} - e^{-\alpha_0(x_0-b)} + e^{\alpha(b-a)} - e^{-a(b-a)}}{r_1 [e^{\alpha(b-x_1)} - e^{-\alpha(b-x_1)}] + r_2 [e^{\alpha(b-x_2)} - e^{-\alpha(b-x_2)}]} \\ &= \frac{1 - e^{-\alpha_0 x_0}}{r_1 e^{-\alpha_0 x_1} + r_2 e^{-\alpha_0 x_2}}, \end{aligned}$$

ecuación que efectivamente es aquella en (4.6).

Conclusiones

El movimiento Browniano fue ampliamente aplicado a lo largo de este trabajo como modelo para describir una entidad que busca activamente un objetivo. Sus principales características y soluciones fueron desarrolladas en el capítulo 1. En él se estudiaron los escenarios típicos en los que puede existir una partícula Browniana abarcando desde un espacio unidimensional sin fronteras (difusión libre) hasta aquél donde existen dos fronteras absorbentes y por supuesto aquél donde la partícula se encuentra confinada por dos paredes completamente reflejantes. Sus soluciones en (1.21), (1.33) y (1.37) constituyeron los pilares necesarios para estudiar procesos de búsqueda donde se introduce la característica de reinicio. Asimismo, se introdujeron cantidades de primer arribo para la cuantificación de procesos de búsqueda, como la probabilidad de supervivencia y el tiempo promedio de captura las cuales a su vez tomaron un papel fundamental en secciones posteriores.

Importantes cuestiones sobre el desempeño de una caminata aleatoria por sí sola como una estrategia de búsqueda fueron abordados en el capítulo 2. En este apartado se reprodujo el hecho de que tal estrategia es infructuosa a la hora de encontrar un blanco objetivo en el origen, se concluyó que la partícula sí tiene oportunidad de llegar a este blanco pero le tomará en promedio un tiempo infinito (1.49) debido a excursiones muy largas que se alejan del origen. La inclusión del mecanismo de reinicio fue crucial en este aspecto, una tasa de reinicio constante r hacia la posición x_0 demostró tener un efecto dramático en el tiempo promedio de captura en comparación a cuando este mecanismo no está presente; este logra hacer finito el tiempo en cuestión e incluso para una $r^* = 2.539D/x_0^2$ lo logra minimizar.

Una de las principales contribuciones de este trabajo radicó en asumir que la posición inicial y de reinicio por parte de la partícula Browniana no son las mismas. Este cambio en las reglas de evolución (2.7) tuvo un impacto directo en $\langle T_r \rangle$ ecuación (3.12). En ella se mostró explícitamente que en un sistema unidimensional semi-infinito con un objetivo en el origen, la entidad buscadora tendrá un primer tiempo de arribo (promedio) que diverge con la posición de reinicio más no con la posición inicial. Sin embargo, gracias a la existencia del parámetro adicional x_r , se logró demostrar que, cualquiera que sea la posición inicial que tome la partícula en el intervalo $[0, \infty)$, la tasa de reinicio r^* que minimiza su tiempo de llegada al blanco, tiene una cota superior dada por $4D/x_r^2$ y una cota inferior D/x_r^2 . Es decir, r^* siempre toma valores en el intervalo $[D/x_r^2, 4D/x_r^2]$.

Adicionalmente, el sistema constituido por dos paredes absorbentes fue estudiado. Los resultados que pudimos extraer respecto a este problema fueron muy interesantes. Como primer acercamiento se observó que dependiendo de la posición inicial y de reinicio, el tiempo promedio de captura en (3.29) podría ser minimizado o no para una $r^* > 0$. Si se proporcionaban ciertos valores de estas posiciones, este tiempo era una función monótona creciente con la tasa de reinicio r ; concluyendo

así que en estos casos el mecanismo de reinicio no mejora la búsqueda de la partícula Browniana hacia las fronteras absorbentes. Por otra parte, pudimos confirmar que la posición de reinicio para que esta partícula pueda optimizar su búsqueda se encuentran cerca de los blancos absorbentes en la región \mathcal{S}_1 ecuación (3.41). Más interesante aún, se descubrió que si x_0 y x_r son diferentes, se agranda la región $\mathcal{D} = \left[\left(0, \frac{5-\sqrt{5}}{10}\right) \cup \left(\frac{5+\sqrt{5}}{10}, 0\right) \right]$ reportada por Arnab en [57] cuando estas posiciones son iguales. La partícula puede reiniciar más lejos con respecto a la región \mathcal{D} y aun así optimizar el proceso de búsqueda.

Finalmente, el problema conformado por dos puntos de reinicio donde cada una de las posiciones de reinicio son diferentes de la inicial fue estudiado. Un NESS (Non-Stationary Steady State por sus siglas en inglés) fue descubierto para el caso estacionario en (4.3). Este se reduce al resultado reportado por Evans y Majumdar en [7] cuando sólo existe un sitio de reinicio.

Como conclusión de este apartado, queremos destacar el resultado que en nuestra opinión es por lejos el más llamativo de este trabajo. En el sistema semi-confinado unidimensional compuesto por un sólo objetivo absorbente en el origen, se ha descubierto una familia de transiciones de fase ligada a las tasas de reinicio óptimas que minimizan el tiempo (4.11). Mencionamos el adjetivo de conjunto “familia” porque existe una transición diferente ligada a cada diferente valor de m ; con $m > 2.902\dots$ siendo una condición necesaria para poder observar este fenómeno. En este asunto, gracias a la simetría mostrada por el tiempo promedio de captura cerca del punto de transición, fue posible aplicar con éxito la teoría de Landau. Esto a su vez desembocó en descubrir que el exponente crítico β asociado a cada una de estas transiciones tiene el mismo valor que aquellos ligados a sistemas termodinámicos en la teoría del campo medio, en especial a transiciones líquido-sólido o, en caso de un sistema magnético, a una transición paramagnético-ferromagnético.



Expansión en series de Fourier de $\delta(x - x_0)$

Gracias a su compromiso con la investigación sobre la conducción de calor, en 1807 Joseph Fourier publicó en uno de sus artículos que una función f en un intervalo periódico $[0, 2\pi]$ podría representarse mediante la expansión en funciones trigonométricas dada por [48]

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos nx + b_n \sin nx). \quad (\text{A.1})$$

En nuestro caso nos interesa expandir en funciones cosenoidales (aquellas expuestas en el capítulo 2) la función delta de Dirac

$$\delta(x - x_0) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos \frac{n\pi}{L}x + b_n \sin \frac{n\pi}{L}x \right), \quad (\text{A.2})$$

esto es debemos encontrar los correspondientes coeficientes a_0 , a_n y b_n en el intervalo $[-L, L]$. El más fácil de calcular es a_0 porque todo lo que tenemos que hacer es integrar toda la ecuación (A.2) aprovechando que los operadores integral y suma conmutan

$$\begin{aligned} \int_{-L}^L \delta(x - x_0) dx &= \frac{a_0}{2} \int_{-L}^L dx + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \int_{-L}^L dx \cos \frac{n\pi}{L}x + b_n \int_{-L}^L dx \sin \frac{n\pi}{L}x \right) \\ &= a_0 L + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{L a_n}{n\pi} \left[\sin \frac{n\pi}{L}x \right]_{-L}^L - \frac{L}{n\pi} b_n \left[\cos \frac{n\pi}{L}x \right]_{-L}^L \right) \end{aligned}$$

y como $n = 1, 2, \dots$ todos los términos de la suma se desvanecen quedándonos con $1 = a_0 L \Rightarrow a_0 = \frac{1}{L}$, por tanto (A.2) es

$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{2L} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos \frac{n\pi}{L}x + b_n \sin \frac{n\pi}{L}x \right). \quad (\text{A.3})$$

Aprovechando la ortogonalidad de las auto-funciones, multipliquemos por $\cos \frac{m\pi}{L}x$ a (A.3) e integremos

$$\int_{-L}^L dx \delta(x - x_0) \cos \frac{m\pi}{L}x = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L dx \cos \frac{m\pi x}{L} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \int_{-L}^L dx \cos \frac{n\pi}{L}x \cos \frac{m\pi x}{L} + b_n \int_{-L}^L dx \cos \frac{m\pi x}{L} \sin \frac{n\pi}{L}x \right), \quad (\text{A.4})$$

el primer término del lado derecho es cero porque la función seno se anula en las fronteras. La integral con los coeficientes b_n puede ser resuelta utilizando la relación trigonométrica $2 \sin(a + b) = \sin(a + b) + \sin(b - a)$, es decir

$$\begin{aligned} b_n \int_{-L}^L dx \cos \frac{m\pi x}{L} \sin \frac{n\pi}{L}x &= \frac{b_n}{2} \left[\int_{-L}^L dx \sin \frac{(n+m)\pi}{L}x + \int_{-L}^L dx \sin \frac{(n-m)\pi}{L}x \right] \\ &= \frac{b_n}{2} \left[\frac{L}{(n+m)\pi} \cos \frac{(n+m)\pi}{L}x \right]_{-L}^L + \frac{b_n}{2} \left[\frac{L}{(n-m)\pi} \cos \frac{(n-m)\pi}{L}x \right]_{-L}^L \end{aligned}$$

y gracias a la propiedad par del coseno $\cos(-a) = \cos a$ lo último es idénticamente cero.

La segunda integral en (A.4) es resuelta gracias a $2 \cos a \cos b = \cos(b - a) + \cos(b + a)$ y suponiendo que $n \neq m$

$$\begin{aligned} a_n \int_{-L}^L dx \cos \frac{n\pi}{L}x \cos \frac{m\pi x}{L} &= \frac{a_n}{2} \left[\int_{-L}^L dx \cos \frac{(n-m)\pi}{L}x + \int_{-L}^L dx \cos \frac{(n+m)\pi}{L}x \right] \\ &= \frac{a_n}{2} \left[\frac{L}{(n-m)\pi} \sin \frac{(n-m)\pi}{L}x \right]_{-L}^L + \frac{a_n}{2} \left[\frac{L}{(n+m)\pi} \sin \frac{(n+m)\pi}{L}x \right]_{-L}^L \\ &= 0, \end{aligned}$$

porque m también es un número entero y tanto $(n - m)\pi$ como $(n + m)\pi$ proporcionarían números enteros de π .

El caso $n = m$ tiene que ser tratado aparte

$$\begin{aligned} a_n \int_{-L}^L dx \cos^2 \frac{m\pi x}{L} &= a_n \int_{-L}^L dx \frac{1 + \cos 2\pi m x}{2} = a_n L + \frac{a_n}{2} \int_{-L}^L dx \cos 2\pi m x \\ &= a_n L + \frac{a_n}{4\pi m} [\sin 2\pi m x]_{-L}^L \\ &= a_n L, \end{aligned}$$

este resultado expone como de toda la suma de términos en (A.4) sólo queda uno y es aquel en donde $n = m$

$$\begin{aligned} \int_{-L}^L dx \delta(x - x_0) \cos \frac{m\pi}{L}x &= a_m L \\ \therefore a_m &= \frac{1}{L} \cos \frac{m\pi}{L}x_0. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Con esto la función $\delta(x - x_0)$ puede ser escrita como

$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{2L} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{L} \cos \frac{n\pi}{L} x_0 \cos \frac{n\pi}{L} x + b_n \sin \frac{n\pi}{L} x \right). \quad (\text{A.6})$$

Finalmente, el último coeficiente b_n se calcula multiplicando (A.6) por $\sin \frac{m\pi}{L} x$ e integrando

$$\begin{aligned} \int_{-L}^L dx \delta(x - x_0) \sin \frac{m\pi}{L} x &= \frac{1}{2L} \int_{-L}^L dx \sin \frac{m\pi}{L} x \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{\cos \frac{n\pi}{L} x_0}{L} \int_{-L}^L dx \cos \frac{n\pi}{L} x \sin \frac{m\pi}{L} x + b_n \int_{-L}^L dx \sin \frac{n\pi}{L} x \sin \frac{m\pi}{L} x \right), \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

la primera integral del lado derecho es cero porque de nuevo la función coseno es par. Además, anteriormente demostramos que $\int_{-L}^L dx \cos \frac{n\pi}{L} x \sin \frac{m\pi}{L} x = 0$ dada cualquier n o m . La nueva integral por hacer es $b_n \int_{-L}^L dx \sin \frac{n\pi}{L} x \sin \frac{m\pi}{L} x$, si consideramos $n \neq m$ entonces

$$\begin{aligned} b_n \int_{-L}^L dx \sin \frac{n\pi}{L} x \sin \frac{m\pi}{L} x &= \frac{b_n}{2} \int_{-L}^L dx \cos \frac{(n-m)\pi x}{L} - \frac{b_n}{2} \int_{-L}^L dx \cos \frac{(n+m)\pi x}{L} \\ &= \frac{b_n L}{2(n-m)} \left[\sin \frac{(n-m)\pi x}{L} \right]_{-L}^L - \frac{b_n L}{2(n+m)} \left[\sin \frac{(n+m)\pi x}{L} \right]_{-L}^L \\ &= 0 \end{aligned}$$

porque tanto $(n-m)\pi$ y $(n+m)\pi$ dan como resultado números enteros de π . El caso $n = m$, por consiguiente se toma en cuenta

$$\begin{aligned} b_m \int_{-L}^L dx \sin^2 \frac{m\pi}{L} x &= b_m \int_{-L}^L dx \sin^2 \frac{m\pi}{L} x = b_m \int_{-L}^L dx \left(1 - \cos^2 \frac{m\pi}{L} x \right) \\ &= 2b_m L - b_m \int_{-L}^L dx \cos^2 \frac{m\pi}{L} x, \end{aligned}$$

pero de arriba sabemos que $\int_{-L}^L dx \cos^2 \frac{m\pi}{L} x = L$:

$$b_m \int_{-L}^L dx \sin^2 \frac{m\pi}{L} x = 2b_m L - b_m L = b_m L,$$

gracias a esto podemos concluir que el exponente b_n para la expansión es

$$b_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L dx \delta(x - x_0) \sin \frac{n\pi}{L} x = \frac{1}{L} \sin \frac{n\pi}{L} x_0. \quad (\text{A.8})$$

Sustituyendo (A.8) en (A.6) y recordando que $\cos(b-a) = \cos b \cos a + \sin a \sin b$ es como llegamos al resultado deseado para la expansión en series de Fourier de $\delta(x - x_0)$:

$$\begin{aligned} \delta(x - x_0) &= \frac{1}{2L} + \frac{1}{L} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\cos \frac{n\pi}{L} x_0 \cos \frac{n\pi}{L} x + \sin \frac{n\pi}{L} x_0 \sin \frac{n\pi}{L} x \right) \\ &= \frac{1}{2L} + \frac{1}{L} \sum_{n=1}^{\infty} \cos \left[\frac{n\pi}{L} (x - x_0) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Difusión libre en un canal unidimensional infinito: Método de la Transformada de Laplace

En este apéndice se considera una partícula en difusión simple que evoluciona mediante la dinámica $x_{t+\Delta t} = x_t + \xi$ donde ξ es una variable Gaussiana aleatoria, es posible demostrar que la ecuación diferencial parcial que describe la evolución temporal de la partícula es la llamada ecuación de Fokker-Planck (sin arrastre) (1.10)

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

dónde x_0 indica la posición inicial de la partícula. En este caso y al igual que en la sección 1.4 la condición inicial es $p(x, 0|x_0) = \delta(x - x_0)$ sin condiciones a la frontera que delimiten la difusión de la partícula. Por otra parte, a diferencia de esta sección el método de solución que se emplea en este caso no es el mismo, pues ahora se considera el enfoque de la transformada de Laplace sobre $p(x, t|x_0)$

$$\tilde{p}(x, s|x_0) = \int_0^\infty dt e^{-st} p(x, t|x_0). \quad (\text{B.1})$$

Como se ha visto a lo largo de este escrito, utilizar y dominar este método es muy útil, sobretodo por su íntima relación con el estado estacionario de una cantidad de interés o por su capacidad para calcular cantidades de primer arribo, como por ejemplo el tiempo promedio de captura mediante la transformada de Laplace en la probabilidad de supervivencia.

Procediendo con el método, se multiplica a toda la ecuación (1.10) por e^{-st} y luego se integra sobre el tiempo

$$\int_0^\infty dt e^{-st} \frac{\partial p(x, t|x_0)}{\partial t} = \int_0^\infty dt e^{-st} D \frac{\partial^2 p(x, t|x_0)}{\partial x^2}$$

Al integrar por partes el lado izquierdo obtenemos

$$\int_0^{\infty} dt e^{-st} \frac{\partial p(x, t|x_0)}{\partial t} = \left[p(x, t|x_0) e^{-st} \right]_0^{\infty} + s\tilde{p}(x, s|x_0),$$

pero teniendo en cuenta la condición inicial podemos evaluar cómodamente el primer término de la derecha $p(x, t|x_0) e^{-st}|_{t \rightarrow \infty} = 0$ y $p(x, t|x_0) e^{-st}|_{t=0} = p(x, t=0, x_0) = \delta(x - x_0)$, por lo tanto

$$\int_0^{\infty} dt e^{-st} \frac{\partial p(x, t|x_0)}{\partial t} = -\delta(x - x_0) + s\tilde{p}(x, s|x_0).$$

De esta manera la ecuación de difusión libre después de aplicarle la transformada de Laplace es

$$D \frac{\partial^2 \tilde{p}(x, s|x_0)}{\partial x^2} - s\tilde{p}(x, s|x_0) = -\delta(x - x_0), \quad (\text{B.2})$$

cuya solución se puede deducir si usamos la identidad [55]

$$A \frac{d^2}{dx^2} e^{-\beta|x-x_0|} = A\beta^2 e^{-\beta|x-x_0|} - 2A\beta\delta(x - x_0),$$

es decir $\tilde{p}(x, s|x_0) = A e^{-\beta|x-x_0|}$ puede convertirse en una solución aceptable con las constantes A y β adecuadas; sustituyendo la expresión anterior de $\tilde{p}(x, s|x_0)$ en (B.2)

$$AD\beta^2 e^{-\beta|x-x_0|} - 2AD\beta\delta(x - x_0) - sA e^{-\beta|x-x_0|} = -\delta(x - x_0).$$

Notamos que se tiene que cumplir lo siguiente

$$\begin{aligned} 2A\beta &= \frac{1}{D} \\ D\beta^2 &= s \end{aligned}$$

o de manera simple $\beta = \sqrt{\frac{s}{D}}$ y $A = \frac{1}{2\sqrt{sD}}$. Con esto la solución $\tilde{p}(x, s|x_0)$ se reescribe de la siguiente manera

$$\tilde{p}(x, s|x_0) = \frac{1}{2\sqrt{sD}} e^{-\sqrt{\frac{s}{D}}|x-x_0|}. \quad (\text{B.3})$$

Una expansión en serie de Taylor a la última ecuación:

$$\tilde{p}(x, s|x_0) = \frac{1}{2\sqrt{sD}} \left[1 - \sqrt{\frac{s}{D}} |x - x_0| + \frac{s}{2D} (x - x_0)^2 + O[s^{3/2}] \right]$$

nos confirma que debido al término $1/2\sqrt{sD}$, la solución (B.3) no tiene un estado estacionario cuando $s \rightarrow 0$.

Ahora, una forma directa de invertir (B.3) es usando la expresión (2.19), a decir [55]

$$\int_0^{\infty} dt t^{-1/2} e^{-\frac{\beta}{t} - \gamma t} = \left(\frac{\pi}{\gamma} \right)^{1/2} e^{-2\sqrt{\beta\gamma}}, \quad (\text{B.4})$$

de dónde se concluye que la única manera para (B.3) ser igual al lado derecho de (B.4) es con $\beta = \frac{(x-x_0)^2}{4D}$ y $\gamma = s$ y por unicidad en la transformada de Laplace, la función en el integrando de (B.4) tiene que ser una función Gaussiana

$$p(x, t|x_0) = \frac{B}{\sqrt{t}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4Dt}} \quad (\text{B.5})$$

con B una constante de normalización que es calculada fácilmente

$$\frac{B}{\sqrt{t}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4Dt}} = \frac{B}{\sqrt{t}} \sqrt{4Dt\pi} = 1 \Rightarrow B = \frac{1}{\sqrt{4\pi D}},$$

con esto llegamos al mismo resultado que en (1.20):

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

Bibliografía

- [1] Connie Rye, Robert Wise, Vladimir Jurukovski, Jean DeSaix, Jung Choi, and Yael Avissar. *32.2 Pollination and Fertilization - Biology*. OpenStax, Houston, Texas, 2016. url: <https://openstax.org/books/biology/pages/32-2-pollination-and-fertilization>.
- [2] Lance Champagne, R. Greg Carl, and Raymond Hill. *Search theory, agent-based simulation, and u-boats in the Bay of Biscay*, volume 1. IEEE Xplore, New Orleans, LA, USA, December 2003. doi: <https://doi.org/10.1109/WSC.2003.1261521>.
- [3] O. Bénichou, C. Loverdo, M. Moreau, and R. Voituriez. Intermittent search strategies. *Reviews of Modern Physics*, 83(1):81–129, March 2011. doi: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.83.81>.
- [4] O. Bénichou, M. Coppey, M. Moreau, P-H. Suet, and R. Voituriez. Optimal Search Strategies for Hidden Targets. *Physical Review Letters*, 94(19):198101, May 2005. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.94.198101>.
- [5] Andrea Montanari and Riccardo Zecchina. Optimizing Searches via Rare Events. *Physical Review Letters*, 88(17):178701, April 2002. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.88.178701>.
- [6] Ernesto P. Raposo Gandhimohan. M. Viswanathan, Marcos G. E. da Luz and H. Stanley Eugene. *The Physics of Foraging: An Introduction to Random Searches and Biological Encounters*. Cambridge University Press, Cambridge, 2011. doi: <https://doi.org/10.1017/CB09780511902680>.
- [7] Martin R. Evans and Satya N. Majumdar. Diffusion with Stochastic Resetting. *Physical Review Letters*, 106(16):160601, April 2011. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.106.160601>.
- [8] Martin R. Evans and Satya N. Majumdar. Diffusion with optimal resetting. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 44(43):435001, October 2011. doi: <https://doi.org/10.1088/1751-8113/44/43/435001>.
- [9] Łukasz Kuśmierz and Ewa Gudowska-Nowak. Optimal first-arrival times in Levy flights with resetting. *Physical Review E*, 92(5):052127, November 2015. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.92.052127>.

-
- [10] Arnab Pal. Diffusion in a potential landscape with stochastic resetting. *Physical Review E*, 91(1):012113, January 2015. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.91.012113>.
- [11] Daniel Campos and Vicenç Méndez. Phase transitions in optimal search times: How random walkers should combine resetting and flight scales. *Physical Review E*, 92(6):062115, December 2015. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.92.062115>.
- [12] Uttam Bhat, Caterina De Bacco, and S. Redner. Stochastic search with Poisson and deterministic resetting. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2016(8):083401, August 2016. doi: <https://doi.org/10.1088/1742-5468/2016/08/083401>.
- [13] Arnab Pal, Anupam Kundu, and Martin R. Evans. Diffusion under time-dependent resetting. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 49(22):225001, April 2016. doi: <https://doi.org/10.1088/1751-8113/49/22/225001>.
- [14] Shlomi Reuveni. Optimal Stochastic Restart Renders Fluctuations in First Passage Times Universal. *Physical Review Letters*, 116(17):170601, April 2016. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.116.170601>.
- [15] R. Falcao and M. R. Evans. Interacting Brownian motion with resetting. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2017(2):023204, February 2017. doi: <https://doi.org/10.1088/1742-5468/aa569c>.
- [16] V. P. Shkilev. Continuous-time random walk under time-dependent resetting. *Physical Review E*, 96(1):012126, July 2017. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.96.012126>.
- [17] Miquel Montero, Axel Masó-Puigdellosas, and Javier Villarroel. Continuous-time random walks with reset events. *The European Physical Journal B*, 90(9):176, September 2017. doi: <https://doi.org/10.1140/epjb/e2017-80348-4>.
- [18] Abhinava Chatterjee, Christos Christou, and Andreas Schadschneider. Diffusion with resetting inside a circle. *Physical Review E*, 97(6):062106, June 2018. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.97.062106>.
- [19] Sergey Belan. Restart Could Optimize the Probability of Success in a Bernoulli Trial. *Physical Review Letters*, 120(8):080601, February 2018. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.080601>.
- [20] Somrita Ray, Debasish Mondal, and Shlomi Reuveni. Péclet number governs transition to acceleratory restart in drift-diffusion. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 52(25):255002, May 2019. doi: <https://doi.org/10.1088/1751-8121/ab1fcc>.
- [21] Satya N. Majumdar, Sanjib Sabhapandit, and Grégory Schehr. Dynamical transition in the temporal relaxation of stochastic processes under resetting. *Physical Review E*, 91(5):052131, May 2015. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.91.052131>.

-
- [22] Martin R. Evans, Satya N. Majumdar, and Kirone Mallick. Optimal diffusive search: nonequilibrium resetting versus equilibrium dynamics. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 46(18):185001, April 2013. doi: <https://doi.org/10.1088/1751-8113/46/18/185001>.
- [23] Stephan Eule and Jakob J. Metzger. Non-equilibrium steady states of stochastic processes with intermittent resetting. *New Journal of Physics*, 18(3):033006, March 2016. doi: <https://doi.org/10.1088/1367-2630/18/3/033006>.
- [24] Denis Boyer, Martin R. Evans, and Satya N. Majumdar. Long time scaling behaviour for diffusion with resetting and memory. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2017(2):023208, February 2017. doi: <https://doi.org/10.1088/1742-5468/aa58b6>.
- [25] Justin Whitehouse, Martin R. Evans, and Satya N. Majumdar. Effect of partial absorption on diffusion with resetting. *Physical Review E*, 87(2):022118, February 2013. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.87.022118>.
- [26] Martin R. Evans and Satya N. Majumdar. Diffusion with resetting in arbitrary spatial dimension. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 47(28):285001, June 2014. doi: <https://doi.org/10.1088/1751-8113/47/28/285001>.
- [27] Christos Christou and Andreas Schadschneider. Diffusion with resetting in bounded domains. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 48(28):285003, June 2015. doi: <https://doi.org/10.1088/1751-8113/48/28/285003>.
- [28] Jaco Fuchs, Sebastian Goldt, and Udo Seifert. Stochastic thermodynamics of resetting. *EPL (Europhysics Letters)*, 113(6):60009, March 2016. doi: <https://doi.org/10.1209/0295-5075/113/60009>.
- [29] Arnab Pal and Saar Rahav. Integral fluctuation theorems for stochastic resetting systems. *Physical Review E*, 96(6):062135, December 2017. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.96.062135>.
- [30] Shlomi Reuveni, Michael Urbakh, and Joseph Klafter. Role of substrate unbinding in Michaelis–Menten enzymatic reactions. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 111(12):4391–4396, March 2014. doi: <https://doi.org/10.1073/pnas.1318122111>.
- [31] Édgar Roldán, Ana Lisica, Daniel Sánchez-Taltavull, and Stephan W. Grill. Stochastic resetting in backtrack recovery by RNA polymerases. *Physical Review E*, 93(6):062411, June 2016. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.93.062411>.
- [32] Gabriel Mercado-Vásquez and Denis Boyer. Lotka–Volterra systems with stochastic resetting. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 51(40):405601, September 2018. doi: <https://doi.org/10.1088/1751-8121/aadbc0>.
- [33] Arnab Pal, Łukasz Kuśmierz, and Shlomi Reuveni. Search with home returns provides advantage under high uncertainty. *Physical Review Research*, 2(4):043174, November 2020. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.2.043174>.

- [34] Xavier Durang, Malte Henkel, and Hyunggyu Park. The statistical mechanics of the coagulation–diffusion process with a stochastic reset. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 47(4):045002, January 2014. doi: <https://doi.org/10.1088/1751-8113/47/4/045002>.
- [35] Alejandro P. Riascos, Denis Boyer, Paul Herringer, and José L. Mateos. Random walks on networks with stochastic resetting. *Physical Review E*, 101(6):062147, June 2020. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.101.062147>.
- [36] Denis Boyer and Citlali Solis-Salas. Random walks with preferential relocations to places visited in the past and their application to biology. *Physical Review Letters*, 112(24):240601, June 2014. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.112.240601>.
- [37] Robert M. Mazo. *Brownian Motion: Fluctuations, Dynamics, and Applications*. Oxford University Press, October 2008. doi: <https://doi.org/10.1093/acprof:oso/9780199556441.001.0001>.
- [38] Albert Einstein. *Investigations on the Theory of the Brownian Movement*. Dover Publications, New York, first thus edition edition, June 1956.
- [39] M. Smoluchowski. *Essai d'une théorie cinétique du mouvement Brownien et des milieux troubles*. Acad. Litterarum Cracoviensis, 1906. url: <https://books.google.com.mx/books?id=UJTeoQEACAAJ>.
- [40] A Fuliński. On Marian Smoluchowski's life and contribution to Physics. *Acta Physica Polonica B*, 29(6):1523–1537, 1998. url: <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1998AcPPB..29.1523F>.
- [41] J. Piasecki. Centenary of Marian Smoluchowski's theory of brownian motion. *Acta Physica Polonica Series B*, 38(5):1623–1629, 2007. url: <https://www.semanticscholar.org/paper/CENTENARY-OF-MARIAN-SMOLUCHOWSKI%27S-THEORY-OF-MOTION-Piasecki/c58cc40ae5eceeec534e5dfe83257b4fb15a039c>.
- [42] Robert Zwanzig. *Nonequilibrium Statistical Mechanics*. Oxford University Press, Oxford, New York, 1st edition, April 2001. ISBN: 978-0-19-514018-7.
- [43] V. Balakrishnan. *Elements of Nonequilibrium Statistical Mechanics*. Ane Books, March 2008. ISBN: 978-1-4200-7419-2.
- [44] IU. L. Klimontovich. *Statistical physics*. New York: Harwood Academic Publishers, 1986.
- [45] Linda E. Reichl. *A Modern Course in Statistical Physics*. John Wiley & Sons, Ltd, 2016. doi: <https://doi.org/10.1002/9783527690497.ch7>.
- [46] Leonardo Dagdug and Vinicio Vázquez. *Difusión en sistemas biológicos*. Universidad Autónoma Metropolitana. url: <https://ixtlan.izt.uam.mx/leo/wp-content/uploads/2021/01/IntFisBio-corregido.pdf>.

- [47] Linda J. S. Allen. *An Introduction to Stochastic Processes with Applications to Biology*. Chapman and Hall/CRC, New York, 2 edition, August 2012. doi: <https://doi.org/10.1201/b12537>.
- [48] George B. Arfken, Hans J. Weber, and Frank E. Harris. *Mathematical Methods for Physicists*. Elsevier India, 7th edition, January 2012. doi: <https://doi.org/10.1016/C2009-0-30629-7>.
- [49] Satya N. Majumdar. Brownian Functionals in Physics and Computer Science. In *The Legacy of Albert Einstein*, pages 93–129. WORLD SCIENTIFIC, December 2006. doi: https://doi.org/10.1142/9789812772718_0006.
- [50] F. Oberhettinger and L. Badii. *Tables of Laplace Transforms*. Springer Berlin, Heidelberg, Berlin West, Heidelberg, New York, 1st edition, August 1973. doi: <https://doi.org/10.1007/978-3-642-65645-3>.
- [51] John P. Nolan. *Univariate Stable Distributions: Models for Heavy Tailed Data*. Springer Series in Operations Research and Financial Engineering. Springer Cham, Cham, 2020. doi: <http://doi.org/10.1007/978-3-030-52915-4>.
- [52] Alan J. Bray, Satya N. Majumdar, and Grégory Schehr. Persistence and first-passage properties in nonequilibrium systems. *Advances in Physics*, 62(3), June 2013. doi: <https://doi.org/10.1080/00018732.2013.803819>.
- [53] Sidney Redner. *A Guide to First-Passage Processes*. Cambridge University Press, Cambridge, 2001. doi: <https://doi.org/10.1017/CB09780511606014>.
- [54] Shamik Gupta and Arun Jayannavar. Stochastic Resetting: A (Very) Brief Review. *Frontiers in Physics*, 10:789097, April 2022.
- [55] Martin R. Evans, Satya N. Majumdar, and Grégory Schehr. Stochastic resetting and applications. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 53(19):193001, April 2020. doi: <https://doi.org/10.1088/1751-8121/ab7cfe>.
- [56] Xavier Durang, Sungmin Lee, Ludvig Lizana, and Jae-Hyung Jeon. First-passage statistics under stochastic resetting in bounded domains. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 52(22):224001, April 2019. doi: <https://doi.org/10.1088/1751-8121/ab15f5>.
- [57] Arnab Pal and V. V. Prasad. First passage under stochastic resetting in an interval. *Physical Review E*, 99(3-1):032123, March 2019. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.99.032123>.
- [58] Arnab Pal and Shlomi Reuveni. First Passage under Restart. *Physical Review Letters*, 118(3):030603, January 2017. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.118.030603>.
- [59] Benjamin Besga, Alfred Bovon, Artyom Petrosyan, Satya N. Majumdar, and Sergio Ciliberto. Optimal mean first-passage time for a Brownian searcher subjected to resetting: Experimental and theoretical results. *Physical Review Research*, 2(3):032029, July 2020. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.2.032029>.

-
- [60] Fernanda H. González, Alejandro P. Riascos, and Denis Boyer. Diffusive transport on networks with stochastic resetting to multiple nodes. *Physical Review E*, 103(6):062126, June 2021. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.103.062126>.
- [61] Arnab Pal and V. V. Prasad. Landau-like expansion for phase transitions in stochastic resetting. *Physical Review Research*, 1(3):032001, October 2019. Publisher: American Physical Society.