

Optimización de parámetros en la localización de blancos mediante desplazamientos intermitentes

por Felix Ramón Rojo Lapalma

Presentado ante la Facultad de Matemática, Astronomía y Física como parte de los requerimientos para la obtención del grado de Doctor en Física de la

UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA

Diciembre, 2011

© FaMAF - UNC 2011

Director de Trabajo de Tesis: Carlos E. Budde

Resumen

En este trabajo de tesis se estudia en forma analítica, y mediante simulaciones tipo Montecarlo, la optimización en la búsqueda y localización de blancos. El tema mencionado describe una de las tareas frecuentes desarrolladas por organismos vivos y está presente en diversos problemas físicos, químicos y biológicos. Mencionemos como ejemplo la asociación de una proteína en un sitio específico del ADN, reacciones químicas, la búsqueda de presas por sus depredadores, operaciones de rescate de víctimas, etc. La localización, mediante estrategias de desplazamientos *intermitentes*, mejora notablemente la detección de blancos comparada con la táctica de proceso de búsqueda permanentemente en un *único* estado. Este mecanismo *intermitente* combina un estado de exploración local (o búsqueda minuciosa) con capacidad de detectar el blanco, con uno de desplazamiento rápido (o relocalización) en el que, generalmente, se carece de la mencionada propiedad. Los cambios entre los dos estados se realizan de manera estocástica de forma tal que existe una frecuencia óptima para la detección. Utilizando las técnicas de Procesos Estocásticos multiestados de Weiss y Montroll, se evalúa en forma analítica la probabilidad de supervivencia del blanco para un dado tiempo en función de las características de los desplazamientos de los buscadores, de los ritmos de transición entre estados y del tipo de atrapamiento. La mencionada técnica permite implementar en forma clara y precisa el concepto de la *Intermitencia* en la localización de blancos, incluyendo diversas características de la búsqueda: sesgo (bias), diferentes longitudes en el desplazamiento de los buscadores, señales ('rastros', 'olores', etc.) que ocasionalmente deja un blanco en su entorno y una dinámica propia para el blanco. Se desarrolla además un formalismo general para la descripción y caracterización de la '*estadística*' del tiempo de vida de un blanco en presencia de varios buscadores y se presenta el estudio del fenómeno de adsorción-desorción en interfaces como un *proceso intermitente*. Este último tema surgió durante el desarrollo del presente trabajo de tesis e involucra procesos que entienden a la *intermitencia* en un sentido más amplio que el estudiado hasta el presente. Por este motivo es nuestra intención profundizar en el estudio de los procesos de adsorción-desorción en interfaces desde el punto de vista de un fenómeno *intermitente*.

Palabras Clave: Caminatas Aleatorias, Optimización, Estrategias de Búsqueda.

PACS:

05.40.-a Fluctuation phenomena, random processes, noise, and Brownian motion.

02.50.Ey Stochastic processes.

Abstract

In this thesis is studied analytically and through Monte Carlo simulations, the optimization of the search and localization of targets. The theme above describes one of the common tasks performed by living organisms and is of intrinsic relevance in many physical, chemical and biological phenomena, as well as in social sciences and ecology. Just to mention a few examples, the association of a protein in a specific DNA site, chemical reactions, the pursuit of prey by predators, operations of rescue of victims, and so on. The location of targets, through *intermittent* search strategies, greatly improves target detection compared with the single-state displacement search tactic. This '*intermittent*' mechanism combines a state of local exploration (or exhaustive search) with ability to detect the target, and a state of long displacement (or relocation state) in which the searchers are generally devoid of such property. The changes between the two states are made stochastic so that there is an optimal frequency for detection. Using the techniques of multi-state stochastic processes of Montroll and Weiss, we evaluate analytically the survival probability of the target for a given time depending on the searchers's characteristics of displacement, the transition rates between states and the type of trapping. The above technique allows to implement in a clear and precise way the concept of *intermittency* in the location of targets, including various features of search processes: bias, different lengths in the displacement of searchers, signs ('trace', 'smell', etc.) that occasionally leaves a target in its environment and a fluctuating (or dynamic) behavior of the target. This work also develops a general formalism for the description and characterization of the '*statistical*' *life time* of a target in the presence of several searchers and presents the study of the phenomenon of adsorption-desorption at interfaces as an *intermittent process*. This last issue arose during the development of this thesis work and involves understanding intermittent processes in a broader sense than the one studied in the first chapters. For this reason is our intention to deepen the study of adsorption-desorption processes at interfaces from the viewpoint of an *intermittent* phenomenon.

Keywords: Random Walk, Optimization, Search Strategies

PACS:

05.40.-a Fluctuation phenomena, random processes, noise, and Brownian motion.

02.50.Ey Stochastic processes.

Agradecimientos

La finalización de un ciclo brinda la oportunidad de realizar un balance y otorgar el merecido reconocimiento a aquellas *Personas e Instituciones* que por su acción lo hicieron posible.

Institucionales

A la Facultad de Matemática Astronomía y Física por facilitarme el lugar de trabajo y las instalaciones para el desarrollo de la presente tesis. Al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas por la financiación de mis estudios de doctorado mediante su sistema de becas.

Compañeros, Amigos y Familia

- A mi Director y *amigo*, Carlos Budde, por su enorme calidad de persona, por las comidas (Gracias Lucy, Carlos Jr. y Poli!), los cafes, las charlas en el bar, por enseñarme que la voluntad, la paciencia, la constancia y el trabajo duro no es otra forma sino que es *la forma*.
- A los muchachos de la 324 por todo el aguante y la buena onda, principalmente, Axel, Luis y el más nuevito Pablo. Por las charlas entre boxes, por los cafes con criollos, y más que nada por hacer más llevadero el día a día en la oficina.
- A mis amigos (que no son muchos), por los asados, las juntadas, un par de oídos cuando hizo falta (por los tirones de oreja también!), por los viajes, por todo aquello que sirve para construir anécdotas y memoria y principalmente por las risas y la alegría que genera recordar esas experiencias.

A mi familia:

- a mi Mamá por haber hechos sacrificios (seguramente infinitos más de los que pueda alguna vez llegar a conocer) para que yo pueda llegar a este momento. Por su honestidad, su férrea tenacidad y su contracción absoluta al trabajo. Por formarme y hacerme la persona que hoy soy.
- a Carlos, porque no hace falta ser padre biológico para ser *Padre*.
- a mis hermanos, Vicente, Ezequiel y Juan Carlos, por que el haber estudiado no es solo mérito mío, sino sacrificio de ellos también.

A Itatí, mi compañera, amiga y soporte desde ya hace 6 años (y espero muchos más!), por alegrar y dar sentido, día a día, a mi vida.

No existe frase que exprese todo el agradecimiento que ustedes merecen, solo espero haber hecho lo suficiente como para corresponder toda la atención y cariño que Uds. me dispensaron...

...Gracias!!!

Índice general

Resumen	II
Abstract	III
Agradecimientos	IV
1. Introducción: Los procesos intermitentes	1
1.1. La búsqueda o localización de blancos	2
1.1.1. Sobre la búsqueda en general	2
1.1.2. Sobre la búsqueda en particular: antecedentes	3
1.2. Procesos de adsorción-desorción en interfaces	4
1.3. Organización del trabajo	5
2. Búsqueda intermitente de un blanco	7
2.1. Introducción	7
2.2. Caminatas aleatorias multiestado: un breve resumen	8
2.2.1. Transiciones Markovianas entre estados internos	9
2.2.2. Propagadores tipo CTRW	10
2.3. El modelo: ‘Búsqueda intermitente de un blanco’	10
2.3.1. Antitransformada de Fourier: solución exacta	12
2.3.2. Antitransformada de Fourier: alta tasa de transiciones entre estados internos ($(\gamma_1 + \gamma_2) \gg 1$)	13
2.3.3. Teoremas Tauberianos en el régimen $(\gamma_1 + \gamma_2) \gg 1$	15
2.3.4. Ausencia de transiciones entre estados ($\gamma_1 = \gamma_2 = 0$): ‘búsqueda monoestado’	16
2.4. Ilustraciones	17
2.5. Conclusiones del capítulo	21
3. Búsqueda intermitente de blancos: relocalización y desplazamientos ses-	22
gados	
3.1. Introducción	22
3.2. Algunos resultados de la teoría de caminatas aleatorias multiestado	23
3.3. El modelo: relocalización y desplazamientos sesgados en la <i>búsqueda inter-</i> <i>mitente</i>	24
3.3.1. Longitud del desplazamiento y su efecto en el proceso de búsqueda	25

3.3.2.	Caminatas aleatorias “sesgadas”	26
3.4.	Ilustraciones	27
3.5.	Conclusiones del capítulo	33
4.	Búsqueda intermitente de un blanco: ‘pistas en el camino’	34
4.1.	Introducción	34
4.2.	Enfoque Analítico	35
4.2.1.	El proceso compuesto	35
4.2.2.	El proceso de atrapamiento	36
4.2.3.	Altas tasas de transición entre estados del caminante	37
4.2.4.	El modelo: “pistas en el camino”	38
4.3.	Ilustraciones	40
4.4.	Conclusiones del capítulo	44
5.	Supervivencia y Tiempo medio de vida de un blanco en presencia de N buscadores independientes	46
5.1.	Introducción	46
5.2.	Tiempo medio de vida del blanco (MTL)	47
5.3.	Tiempo del primer pasaje (FPT)	48
5.4.	MTL en d -dimensiones	49
5.4.1.	Una dimensión ($d = 1$)	51
5.4.2.	Dos dimensiones ($d = 2$)	51
5.4.3.	$d \geq 3$	52
5.5.	Distribuciones iniciales conjuntas	52
5.5.1.	Concentrada	52
5.5.2.	Sitios igualmente probables (distribución uniforme)	53
5.6.	Ilustraciones	54
5.6.1.	Cadenas finita y semi-infinita	54
5.6.2.	MTL en el límite termodinámico en d -dimensiones	56
5.6.3.	Atrapamiento imperfecto en el espacio continuo	57
5.7.	MTL en el esquema de búsqueda intermitente	58
5.8.	Conclusiones del capítulo	61
6.	Búsqueda intermitente de un blanco dinámico	62
6.1.	Introducción	62
6.2.	Enfoque Analítico	63
6.2.1.	El Modelo: Búsqueda Intermitente de un Blanco Dinámico	63
6.2.2.	El Proceso de Atrapamiento	65
6.3.	Resultados Analíticos	66
6.3.1.	Cadena homogénea infinita	67
6.3.2.	Anillo de M sitios	68
6.3.3.	Alta tasa de transiciones en el atrapamiento dinámico	69
6.4.	Ilustraciones	70
6.5.	Conclusiones del capítulo	74

7. Procesos de adsorción-desorción en interfaces: un enfoque a través del formalismo de las ecuaciones maestras	76
7.1. Introducción	76
7.2. Enfoque analítico	78
7.2.1. El Modelo	78
7.2.2. Formalismo matricial y resultados analíticos	79
7.3. Ilustraciones	83
7.3.1. Enfoque MC	87
7.4. Conclusiones del capítulo	88
8. Conclusiones y Comentarios Finales	90
8.0.1. La búsqueda como un proceso intermitente	90
8.0.2. Estudio del fenómeno de adsorción-desorción en interfaces como un <i>proceso intermitente</i>	94
A. Un poco de Matemática	96
A.1. Transformadas	96
A.1.1. Transformada de Fourier	96
A.1.2. Transformada de Laplace	98
A.2. Teoremas Tauberianos	98
B. Escaleo en λ	100
C. Técnica de la inhomogeneidad local	101
D. Desarrollo de Dyson	103
E. Inversión Numérica en Laplace	105
F. Publicaciones	107

Índice de figuras

2.1.	$S_{Mar}(\gamma_1, \gamma_2; t = 100)$, Número medio de sitios distintos visitados para el caso marginal (la captura se produce en cualquiera de los estados) como función de las tasas de transición γ_1 y γ_2	17
2.2.	(a) Secciones de $S_{Mar}(\gamma_1, \gamma_2 = cte; t)$ vs γ_1 . Las curvas corresponden a cortes de la superficie en la figura 2.1	18
2.2.	(b) Curvas correspondientes a la probabilidad de supervivencia $\Phi_{Mar}(\gamma_1; t) = e^{-\rho S_{Mar}(\gamma_1; t)}$. $S_{Mar}(\gamma_1; t)$ corresponde a las curvas presentadas en 2.2 (a)	19
2.3.	Número medio de sitios distintos visitados, $S_2(\gamma_1, \gamma_2; t = 100)$, como función de γ_1 y γ_2 , cuando la captura es posible <i>solo</i> en el estado 2.	19
2.4.	$S_{Mar}(t; \alpha)$ vs α para diferentes tiempos $t = 50, 100, 1000$. Las curvas continuas corresponden a resultados de la sección 2.3.2 y las curvas en líneas de puntos a resultados de la sección 2.3.3.	20
3.1.	Diagrama del esquema de búsqueda	24
3.2.	Resultados analíticos-numéricos (líneas) y simulaciones Monte Carlo (símbolos) para $S(t)$ - <i>número medio de sitios distintos visitados</i> - hasta $t = 100$, como una función de α . Representamos en la figura diferentes longitudes de salto en el estado 2 (relocalización): círculos -segundos vecinos-, cuadrados -terceros vecinos- y cruces -cuartos vecinos-.	28
3.3.	$S(t)_{Max}$ - <i>número medio de sitios distintos visitados en α_{Max}</i> (probabilidad de transición que maximiza $S(t)$)- como función de la longitud de salto (en el estado 2) N . Inset: α_{Max} también como función de la longitud de salto N . Los resultados presentados corresponden a simulaciones de Monte Carlo.	29
3.4.	$S(t)$ como una función de α para el caso que existe un pequeño sesgo en ambos estados ($a = \tilde{a}$). Símbolos corresponden a simulaciones tipo Monte Carlo para $a = 0,5$ -círculos- (sin sesgo), $a = 0,51$ -triángulos- y $a = 0,55$ -cuadrados- respectivamente y las curvas continuas corresponden a resultados analíticos-numéricos.	30
3.5.	a -Diagrama de Fases del sistema cuando existe sesgo en ambos estados para un tiempo $t = 100$ como una función de α (parámetro que regula la intermitencia) y la diferencia de sesgos ($a - \tilde{a}$). En la figura un color más oscuro identifica un valor más alto de $S(\alpha, a - \tilde{a}; t = 100)$	31

3.5. Resultados analíticos-numéricos (líneas) y simulaciones de Monte Carlo (símbolos) para el *número medio de sitios distintos visitados* hasta $t = 100$, para un movimiento cuasi-balístico en el estado 1 ($a = 0,9$). (b) Movimiento sesgado hacia la derecha en el estado 2, círculos $\tilde{a} = 0,1$ (I), cuadrados $\tilde{a} = 0,3$ (II), cruces $\tilde{a} = 0,45$ (III). (c) Movimiento sesgado hacia la izquierda, cruces $\tilde{a} = 0,6$ (IV), cuadrados $\tilde{a} = 0,7$ (V), círculos $\tilde{a} = 0,9$ (VI). 32

4.1. Esquema de transiciones entre sitios de la cadena y estados internos del buscador: el estado 1 corresponde a la fase de relocalización y el estado 2 corresponde a la fase de exploración compacta 38

4.2. Esquema de transiciones para la distribución de probabilidad marginal en el regimen de alta tasa de transiciones. 39

4.3. (a) Resultados analíticos-numéricos (líneas) y simulaciones Monte Carlo (símbolos) correspondientes a la probabilidad de supervivencia $\Phi^{II}(\alpha; t)$ en función de α para diferentes tiempos ($\circ - t = 10$, $\blacksquare - t = 20$, $\Delta - t = 50$, $\blacktriangledown - t = 100$) y para una “capacidad de detección” $p = 0.9$ 41

4.3. (b) Resultados analíticos-numéricos (líneas) y simulaciones Monte Carlo (símbolos) correspondientes a la probabilidad de supervivencia $\Phi^{II}(\alpha; t)$ en función de α para un tiempo fijo ($t = 20$) y para diferentes capacidades de detección: $\circ - p = 0.1$; $\blacksquare - p = 0.4$, y $\blacktriangledown - p = 0.9$ 42

4.4. Dependencia de la Probabilidad de Supervivencia (*vs* α) respecto a la extensión de la inhomogeneidad y a la capacidad de detección p . Los datos (obtenidos via simulaciones MC) corresponden a los intervalos: $[-1, 1]$ (\circ), $[-2, 2]$ (\blacksquare); $[-4, 4]$ (Δ), y $[-9, 9]$ (\blacktriangledown). En (a) presentamos el caso $p = 0.1$ y en (b) el caso $p = 0.9$ 43

4.5. Probabilidad de supervivencia $\Phi^{II}(\alpha_{Opt}; t)$ (α_{Opt} : probabilidad de transición que *minimiza* la SP) como función de la capacidad de “detección” p para diferentes extensiones del ‘rastros’: $[-1, 1]$ (Δ), $[-2, 2]$ (\circ); $[-4, 4]$ (\blacksquare), y $[-9, 9]$ (\blacktriangledown). Inset: α_{Opt} también como función de la capacidad de “detección” p y para diferentes extensiones del ‘rastros’. Los resultados presentados corresponden a simulaciones de Monte Carlo. 44

5.1. T_N como función del número N de caminantes para una cadena con una trampa en el origen. El caso finito corresponde a $L = 10$ sitios y dos distribuciones iniciales diferentes: Concentrados (CON), en el sitio $s = 1$ o el sitio $s=10$; y con todos los sitios igualmente probables (distribución uniforme) (ELS). El caso semi-infinito (SI) corresponde a todos los caminantes inicialmente concentrados, en $s = 1$ o en el sitio $s = 10$. Las líneas de puntos son sólo una guía para el ojo. 55

5.2. T_ρ como función de la concentración de caminantes ρ , para una cadena con un blanco en el origen. El caso semi-infinito (SI) corresponde al límite termodinámico y el finito corresponde a $L = 10$ sitios ($\rho = N/L$) y todos los caminantes inicialmente concentrados (CON), en el sitio $s = 1$ o en $s = 10$; o todos los sitios igualmente probables (ELS). Las líneas de puntos son solo una guía para el ojo. 56

5.3.	T_ρ como función de la concentración de caminantes(ρ) en el límite termodinámico, para diferentes redes. El número de coordinación de las redes, de arriba hacia abajo es, $\kappa = 2, 3, 4, 5, 6, 8, 12$	57
5.4.	T_N como función del número N de caminantes para la línea semi-infinita con una trampa imperfecta en el origen. Las líneas de puntos son solo una guía para el ojo.	59
5.5.	T_ρ en el límite termodinámico, para una concentración $\rho = 0.1$ de caminantes, como función de los parámetros γ_1 y γ_2	60
6.1.	(a) Esquema de transiciones del caminante desde/hacia el sitio s (lejos del blanco: $s \neq -1, 0, 1$) y (b) Transiciones del caminante desde/hacia $s = 0$ (blanco). Un caminante en el sitio 0 puede capturar el blanco si este se activa (con una tasa γ_2) antes de su partida de ese sitio. La dinámica del blanco/trampa es independiente de la dinámica del caminante.	65
6.2.	Resultados analíticos-numéricos (líneas) y simulaciones Monte Carlo (símbolos) para la SP, $\Phi_N(\alpha; t)$, hasta el tiempo $t = 20$ para diferentes tasas de transición del blanco (γ). (I) (diamantes) $\gamma = 0,01$, (II) (triángulos) $\gamma = 0,1$, (III) (círculos) $\gamma = 1$ y (IV) (cuadrados) $\gamma = 10$. Se ha incluido a modo de comparación el caso de blanco no fluctuante-trampa estática (línea continua gruesa).	71
6.3.	Resultados analíticos-numéricos (líneas) y simulaciones Monte Carlo (símbolos) para el Tiempo Medio de Vida del Blanco (MTL) T_ρ , para diferentes tasas de transición del blanco (γ). (I) (diamantes) $\gamma = 0,01$, (II) (triángulos) $\gamma = 0,1$, (III) (círculos) $\gamma = 1$ y (IV) (cuadrados) $\gamma = 10$. Se ha incluido a modo de comparación el caso de trampa estática/blanco no fluctuante (línea continua gruesa).	72
6.4.	Tiempo medio de vida del Blanco (MTL), para una tasa fija de transición del blanco ($\gamma = 1$), como función del parámetro de intermitencia del caminante α y para diferentes tamaños, M , de la cadena. De abajo hacia arriba $M = 20, 40, 60, 100, 200, 1000$ y $M = \infty$ (línea continua gruesa).	73
6.5.	Resultados analíticos-numéricos (líneas) y simulaciones Monte Carlo (símbolos) para la SP, $\Phi(\alpha; t)$, hasta el tiempo $t = 20$, en el regimen de alta tasa de transiciones del blanco. Líneas con símbolos corresponden al caso ‘imperfecto’ (<i>alta tasa de transiciones</i>) y el mismo tipo de líneas (pero sin símbolos) para el atrapamiento dinámico. De arriba hacia abajo, (I) (cuadrados) $\nu = 2, \gamma = 1$; (II) (círculos) $\nu = 5, \gamma = 2,5$ y (III) (triángulos) $\nu = 20, \gamma = 10$. Se ha incluido a modo de comparación el caso de blanco no fluctuante-trampa estática (línea continua gruesa).	74
7.1.	Esquema de transiciones del caminante desde/hacia la línea base ($m = 0$) y desde/hacia un sitio genérico en la superficie. Observe que el sitio trampa (círculo vacío) puede ser alcanzado desde la superficie (con tasa de transición γ) y desde la línea base (con tasa de transición β).	79

7.2.	MFPT como función de la tasa de desorción (en escala logarítmica) δ , con $M = 10$ (inset: $M = 30$), $N = 20$, para diferentes valores de la tasa de transición (sobre la línea base) β . De abajo hacia arriba $\beta = 0.3, 0.1, 0.08, 0.05$. Las líneas corresponden a resultados analíticos y los símbolos a simulaciones MC.	84
7.3.	MFPT como función de la tasa de desorción (en escala logarítmica) δ , con $\beta = 0.1$, $N = 20$, para diferentes valores de M (tamaño del sistema en la dirección y). De abajo hacia arriba $M = 4, 10, 14, 20$. Curvas continuas (líneas) identifican cálculos analíticos y símbolos identifican simulaciones de Monte Carlo.	85
7.4.	Diagrama de fases que resume la <i>existencia/no-existencia</i> de ‘transporte óptimo’, para un tamaño fijo del sistema en la dirección x , $N = 20$ (inset: $N = 40$). Las regiones blancas corresponden a transporte <i>no-óptimo</i> , mientras que regiones oscuras identifican regímenes de <i>transporte óptimo o mejorado</i> . Las curvas continuas corresponden a los valores límites para M determinados por la relación (7.19).	86
7.5.	Esquema de transiciones del caminante desde/hacia las fronteras del sistema y desde/hacia un sitio genérico en el interior de la superficie. Observe que el ‘sitio trampa’ (círculo vacío) puede ser alcanzado desde la (con una tasa de transición γ) y desde la frontera inferior (con una tasa de transición β).	87
7.6.	(a) MFPT como función de la tasa de desorción δ , con $M = 10$, $N = 20$, para diferentes valores de la tasa de transición (sobre las fronteras) β . De abajo hacia arriba $\beta = 0.1, 0.5, 1, 2, 4$. (b) MFPT como función de δ , con $\beta = 2$, $N = 20$, para diferentes valores de M (tamaño del sistema en la dirección y). De abajo hacia arriba $M = 2, 10, 14, 20, 40$. Todos los resultados corresponden a simulaciones MC.	88
E.1.	La gráfica corresponden a $\delta_i(x - 1)$ para Kryshniy, Gaver y Post-Widder (en rojo, azul y verde, respectivamente) para $R = 20$, $a = 1$, $\alpha = 0$ y $N = 20$	106

Capítulo 1

Introducción: Los procesos intermitentes

Los *procesos intermitentes* se encuentran presentes en numerosos fenómenos de las más variadas disciplinas. En términos generales, esta clase de procesos implican ¹:

- un **agente** con capacidad de desplazarse (partículas, buscador, etc.),
- dos o más **fases** entre las que se alterna.

El concepto de **fase** debe entenderse en un *sentido amplio* ya que, dependiendo del contexto, puede tratarse de diferentes formas de propagación, como es el caso de la *búsqueda intermitente* donde las fases de búsqueda activa se alternan con estados de relocalización ([1]); interfaces diferentes, cuando un reactivo, que difunde libremente en un solvente y de manera *intermitente* se une a la superficie de un cilindro ([2]), etc. Este tipo de comportamiento se encuentra también en la unión de una proteína a sitios específicos del ADN en el fenómeno de regulación de la transcripción ([3, 4, 5]). En el ámbito de las disciplinas que estudian el comportamiento de las interfaces ([6, 7]), la dinámica de adsorción y desorción de moléculas es de importancia fundamental, tanto por el interés referido a la comprensión del comportamiento microscópico de aquellas, como por sus aplicaciones tecnológicas. Citemos como ejemplos de estas últimas la producción de soluciones o fundiciones de macromoléculas sintéticas ([8, 9]) y de dispersiones coloidales ([10]), la fabricación de nanoestructuras mono - y multi - capas ([11, 12]), etc. Los ejemplos mencionados muestran la variedad de fenómenos, y la pertenencia a diferentes disciplinas de cada uno de ellos, que pueden describirse como un *proceso intermitente*. Dentro de estos procesos se encuentran los llamados *esquemas intermitentes de búsqueda*, a cuyo estudio está dedicado la mayor parte de este trabajo de tesis.

En la sección siguiente presentamos (1.1) la motivación y antecedentes para el estudio de los *esquemas o estrategias de búsqueda intermitente*. En una sección posterior (1.2),

¹La caracterización de *proceso intermitente* que presentamos es de carácter ‘operativo’ y no pretende ser exhaustiva.

mencionamos sintéticamente la motivación para el análisis de *los procesos de adsorción-desorción en interfaces*. Este tema, que surgió durante el desarrollo del presente trabajo, se enmarca dentro de los *procesos intermitentes* y ubica al fenómeno de la intermitencia en un marco más amplio que el estudiado hasta el momento.

1.1. La búsqueda o localización de blancos

1.1.1. Sobre la búsqueda en general

“¿Dónde dejé las llaves?”², pregunta recurrente en diversos escenarios (¡sobre todo ante una urgencia!). Las acciones posteriores que se generan para hallar el objeto perdido representan un ejemplo “doméstico” para situaciones más generales de búsqueda. La búsqueda o localización de blancos (u objetivos en sentido genérico) juega un rol muy importante en diversos problemas físicos, químicos y biológicos, como así también en el ámbito de las ciencias sociales. Ejemplos típicos de estos procesos son: reacciones químicas donde los reactantes están diluidos en un solvente y deben producirse encuentros entre ellos para que se produzca el enlace, la asociación de una proteína en un sitio específico del ADN, la absorción de medicamentos en lugares específicos del organismo, operaciones de rescate de víctimas, prospección de diversos tipos de yacimientos, interacciones entre individuos de distintas especies, etc. Las interacciones biológicas son interespecíficas y por consiguiente unas de las más complejas, siendo quizás la más común, la interacción trófica en la cual está presente un “consumidor” y un “consumible”. Este tipo de interacción puede adoptar la forma de predación (zorros y liebres), infección parásita (las enredaderas sobre ciertos árboles) o mutuo beneficio (flores y polinizadores). Obviamente la localización de un blanco implica el desplazamiento de “buscadores” hasta el momento del encuentro. Sin embargo existe la posibilidad de que el encuentro no sea exitoso (atrapamiento “imperfecto”) por diversas razones, como la impericia del buscador, camuflaje del blanco, etc. En estos casos, una vez que algún buscador y el blanco están en el mismo sitio la búsqueda aún puede continuar. Ejemplos típicos son: reacciones químicas en las cuales no se produce el enlace pese al encuentro de los reactantes, transporte de iones o átomos a través de membranas celulares mediadas por proteínas, etc. Esta “falla” en la localización, que puede interpretarse como un caso particular del atrapamiento “dinámico”, suele deberse al comportamiento fluctuante del blanco. Estas fluctuaciones ocasionan que el encuentro buscador - blanco no resulte necesariamente en captura y pueden deberse a mecanismos internos propios o ser el resultado de interacciones con un entorno dinámico.

²o el control remoto cuando están por transmitir el partido de su equipo favorito, o la tarjeta del mecánico cuando se avería el auto (¡y sobre todo en la ruta!), etc...

1.1.2. Sobre la búsqueda en particular: antecedentes

La literatura relativa a los problemas de “búsqueda” se ha incrementado notablemente en los últimos años motivando la publicación de una variedad importante de libros y artículos [13, 14, 1, 15]. El *problema de la búsqueda* (también conocido como *persecuciones y escapes*) parece³ tener su origen en un trabajo del matemático e hidrógrafo francés Pierre Bouguer (1698-1758). En dicho trabajo (publicado en el año 1732) Bouguer trató el caso de un barco pirata en ‘persecución’ de un buque mercante ‘evasivo’ (‘o en escape’). Desde entonces han aparecido resultados relativos al ‘problema de la búsqueda’ en variados campos y disciplinas [13, 14]. Más cercano a nuestro tiempo, precisamente durante la Segunda Guerra Mundial, y en un problema similar al de Bouguer, dilucidar esquemas adecuados de búsqueda para la captura o ‘cacería’ de submarinos enemigos jugó un rol muy importante en proyectos relacionados con la búsqueda y localización [16]. Los procesos de *búsqueda* no son una característica exclusiva de los seres humanos sino que forman parte de problemas en los cuales existe un objeto de interés (blanco) que el buscador (investigador) desea encontrar. En el campo de la biología, la búsqueda de alimento, pareja o refugio juega un papel central en la supervivencia de la especie; en esta área existe una extensa lista de estudios que muestran la enorme adaptabilidad de animales y vegetales para la captación de lo que sus organismos requieren ([17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25]). Entre estos trabajos, los de O’Brien y Kramer ([19, 20] respectivamente) presentan los primeros resultados de ‘campo’ que motivan el estudio de *búsqueda intermitente* y que será el objetivo central de este trabajo de tesis. A un nivel “microscópico”, los procesos de búsqueda y localización son también frecuentemente observados. Citemos como ejemplo la unión de una proteína a sitios específicos del ADN en el fenómeno de regulación de la transcripción ([3, 4, 5]) o en el ‘reparto puntual o localizado’ de medicinas ([26]).

Un esquema *óptimo* de búsqueda: *La Búsqueda Intermite*

La necesidad de minimizar los tiempos de localización de blancos (por economía de recursos o por motivos tan críticos como la supervivencia misma) plantea el problema de dilucidar cual es la mejor estrategia de búsqueda. Una vez decidida la estrategia, debe definirse la forma más adecuada u *óptima* de implementarla. En la última década se han realizado numerosos aportes ([27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41]) en esta área. Entre ellos resaltamos el de *Viswanathan y colaboradores* ([37]), uno de los primeros modelos en el cual se observó una optimización en el proceso de búsqueda; este trabajo (y un considerable número de los citados más arriba) están basados en los llamados *vuelos de Lévy* (*Lévy flights*)-(LF)⁴ para el desplazamiento, con trayectorias balísticas orientadas en forma aleatoria. Comparaciones realizadas ([34, 36]) entre desplazamientos tipo LF y *brownianos* (*difusivos*) indican que los *vuelos de Lévy* son los que brindan los resultados más eficientes (minimizando el tiempo de encuentro) **en el caso** de búsqueda

³Para una discusión más específica sobre este punto ver [14].

⁴Un tipo de transporte aleatorio en el cual la distribución de probabilidad del tamaño de cada paso se comporta como $\rho(r) \sim r^{-\gamma}$ para $1 < \gamma < 3$. La varianza de cada paso es infinita y por lo tanto $\langle r^2(t) \rangle = \infty$.

“no destructiva” y en situaciones de baja densidad de presas. Por *búsqueda no destructiva* identificamos la situación en la cual el blanco es localizado cuando un buscador se aproxima a una dada distancia y, luego de un tiempo finito, éste se regenera en el mismo sitio del encuentro. Sin embargo las estrategias basadas en *LF* han generado controversias y su ‘beneficio’ puesto en duda (ver [42, 43, 44] y referencias en ellos). Desde un punto de vista biológico, los cuestionamientos provienen de errores en la interpretación (o ‘extrapolación en exceso’) de los datos de campo; desde un punto de vista estadístico por no constituir un modelo ‘realista’ puesto que el tiempo necesario para alcanzar una nueva posición no depende del tamaño del salto y el desplazamiento cuadrático medio diverge para todo tiempo. En este marco, se incrementó el interés en el estudio de la optimización para los procesos de búsqueda y localización mediante una estrategia de desplazamientos *intermitentes* [30, 32, 33], observada frecuentemente en numerosos organismos vivos y que mejora la táctica del proceso de búsqueda permanentemente en el mismo estado. Este mecanismo combina un estado de exploración local minuciosa (por ejemplo un movimiento difusivo) con capacidad de detectar el blanco, con uno de desplazamiento rápido o relocalización (por ejemplo un movimiento ‘balístico’) en el que, generalmente, se carece de la mencionada propiedad. Los cambios entre los dos estados se realizan de manera estocástica de forma tal que existe una frecuencia óptima para la detección. Recientemente ha surgido un estudio de campo ([45]) que otorga un sólido soporte al *esquema intermitente* y reconcilia los modelos de desplazamientos tipo *LF* y *brownianos (difusivos)*. En este estudio ambos desplazamientos son considerados como *estados o fases* entre los cuales se alterna en el *esquema intermitente* de búsqueda. Mencionemos finalmente que en el proceso de búsqueda la localización tiene éxito no sólo al producirse el encuentro físico de los participantes (presa-depredador, reactantes, minero-veta de oro), sino cuando se concreta la reacción química, se aniquila el blanco, se rescata a la víctima, etc. Este fenómeno es conocido como atrapamiento “imperfecto” o dinámico y ha sido extensamente estudiado en diversas disciplinas científicas y técnicas. Actualmente se conocen muy pocos modelos *analíticos* que muestren optimización en el *proceso de búsqueda intermitente* y que contemplen, además, la imperfección o la dinámica en el atrapamiento.

Este trabajo de tesis está orientado precisamente a la formulación de un modelo general que abarque las características mencionadas arriba: intermitencia en el proceso de búsqueda (incluyendo sesgo y diferentes longitudes en el desplazamiento de los buscadores, señales que deja un blanco en su entorno, etc.), optimización en la localización del blanco, imperfección y/o dinámica en el atrapamiento. En todos los casos los resultados analíticos obtenidos han sido comparados con simulaciones tipo Montecarlo.

1.2. Procesos de adsorción-desorción en interfaces

En la dinámica de procesos de difusión y captura de partículas, la difusión mediada por volumen y/o superficies es de vital importancia como mecanismo de transporte y se encuentra presente en numerosos procesos químicos, físicos y biológicos. El fenómeno de adsorción-desorción involucra una interfaz que separa un medio, en el que las partículas

son solubles, de otro que puede ser sólido, líquido o gaseoso. Citemos como ejemplo la deposición de proteínas sobre superficies celulares o membranas biológicas ligadas a clusters receptores e inmovilizadores de enzimas ([46]), la relajación de la función dieléctrica por defectos móviles ([47]), la difusión de proteínas en cadenas de ADN ([2, 3]), la dispersión de electrones en sólidos amorfos, en la producción de soluciones o fundiciones de macromoléculas sintéticas ([8, 9]), en la fabricación de nanoestructuras mono - y multi - capas ([11, 12]), etc.

Cuando las partículas adsorbidas son solubles en el medio el proceso de adsorción-desorción ocurre continuamente. Estas partículas difunden en la interfaz y luego se desorben realizando excursiones en el volumen y/o superficie para ser nuevamente adsorbidas; la repetición de este mecanismo resulta en una difusión efectiva entre interfaces. Si alguna de las interfaces posee sitios específicos de captura (perfecta, imperfecta y/o dinámica), se tendrá un proceso de atrapamiento en el cual, la difusión a lo largo de cada interfaz compite con las restantes (interfaces).

En el capítulo 7 de esta tesis analizamos brevemente el impacto de los factores geométricos y la competencia entre los diferentes caminos (de frontera y superficiales) para un sistema bidimensional.

1.3. Organización del trabajo

Este trabajo de tesis fue redactado de forma tal que cada capítulo sea (en lo posible) autocontenido. Con este objetivo cada uno de ellos posee el formalismo mínimo necesario y motivaciones adecuadas para que su lectura pueda realizarse de manera independiente de los demás. Teniendo en cuenta que cada capítulo es prácticamente autocontenido, el lector interesado puede utilizar el siguiente esquema de lectura si desea conocer sobre algún tema en particular:

- **Modelo original** - Capítulo 2 ([48]): en el cual se define el marco teórico correspondiente al *esquema o estrategia de búsqueda intermitente*, en el que se basa esta tesis y es el primer aporte original del presente trabajo. Este capítulo presenta la definición y formulación rigurosa de los procesos de transporte multiestado y la explicación detallada del formalismo de *Caminatas Aleatoria de Tiempo Continuo Multiestado - MCTRW* mediante el cual se modela el *proceso de búsqueda intermitente*.

- **Primera extensión del modelo** - Capítulo 3 ([49]): en el que se introduce la primera extensión al modelo original (Cap. 2) incorporando diferentes ‘comportamientos de búsqueda’: distintas longitudes de desplazamiento y la introducción de una asimetría (sesgo) para el movimiento del buscador. En este capítulo se incorporan simulaciones de tipo Monte Carlo y son comparadas con resultados analíticos-numéricos.

- **Segunda extensión del modelo** - Capítulo 4 ([50]): en el que se presenta una nueva extensión del modelo (Caps. 2 y 3) incorporando un aspecto relevante para un proceso realista de búsqueda: la consideración de ‘señales’ que puede dejar un blanco en

su entorno. La inclusión de estas señales fue motivada por estudios [23, 24, 25, 40] que ponen en evidencia la necesidad de incorporar el ‘ambiente’ (o entorno) en el proceso de búsqueda. En este capítulo se hace uso de la *técnica de inhomogeneidad local*.

- **Estadística del tiempo de vida de un conjunto de buscadores** - Capítulo 5 ([51]): En el curso de este trabajo de tesis surgió la necesidad de generar herramientas (alternativas a las se implementan en esta área) que, si bien son de carácter más general que el tema específico de la presente investigación, mostraron ser de gran utilidad para caracterizar adecuadamente las *estrategias de búsqueda*. En este capítulo se desarrolla un formalismo unificado que permite caracterizar la *estadística del tiempo de vida* de un blanco en presencia de un conjunto de buscadores independientes.

- **Nuevo aporte al modelo de búsqueda intermitente:** En el Capítulo 6 ([52]) se presenta un nuevo ingrediente para el proceso de atrapamiento. Particularmente se completan y extienden los resultados obtenidos en los capítulos 2, 3 y 4 utilizando las herramientas desarrolladas en el capítulo 5. Se introduce una dinámica en el proceso de atrapamiento del blanco (que puede deberse a fluctuaciones internas de éste o a interacciones con un entorno dinámico) la cual ocasiona que el encuentro buscador - blanco no resulte necesariamente en captura.

- **Procesos intermitentes en un sentido más amplio** - Capítulo 7 ([53]): Durante el desarrollo de este trabajo surgió, además, la posibilidad de considerar procesos que involucran la *intermitencia* en un sentido más amplio que el estudiado en capítulos anteriores. En este capítulo se estudian los *Procesos de adsorción-desorción en interfaces* donde la *intermitencia* hace referencia al movimiento en diferentes ‘interfaces’ o ‘planos’. Es nuestra intención continuar con el análisis de estos procesos en un futuro próximo.

Finalmente, en el Capítulo 8, se resumen las conclusiones y posibles extensiones del presente trabajo. En los apéndices se encuentran las definiciones de las magnitudes utilizadas, la teoría elemental de los *teoremas Tauberianos*, la técnica de la *inhomogeneidad local*, el desarrollo de *Dyson* y una breve referencia a la rutina utilizada para la inversión numérica en *Laplace*.

Capítulo 2

Búsqueda intermitente de un blanco

2.1. Introducción

El estudio de estrategias ‘óptimas’ de búsqueda de blancos ha experimentado un rápido crecimiento y recientemente ha motivando numerosos trabajos en el tema. Este avance se debe a las importantes aplicaciones de estas estrategias en una gran variedad de procesos físicos, químicos y fenómenos biológicos, así como en las ciencias sociales y la ecología [30, 31, 32, 33, 34, 35].

Recientemente se han realizado estudios orientados a la búsqueda ‘no-destructiva’ [35, 36, 54, 37], en la cual el blanco vuelve a aparecer después de algún tiempo en el mismo lugar o el buscador permanece siempre dentro de un entorno acotado. Otros aportes se basan en los llamados vuelos de Lévy con trayectorias balísticas reorientadas al azar. En todos los casos mencionados se obtiene una metodología de búsqueda óptima. Sin embargo, otro tipo de búsqueda aleatoria ha sido propuesta recientemente [30, 32]: una búsqueda de tipo *intermitente*. Casi la totalidad de los trabajos en el área de las *estrategias intermitentes de búsqueda* [32, 38] están centrados en el análisis del *trapping problem* [30]. Un ejemplo canónico de este enfoque es el de *un* caminante en búsqueda de blancos distribuidos de manera uniforme en el espacio. Este problema puede relacionarse con el modelo de relajación dieléctrica debida a defectos que difunden en el espacio propuesto en la referencia [55]. En este trabajo estudiamos las *estrategias intermitentes de búsqueda* desde la perspectiva del llamado *target problem*, el cual consiste en un *conjunto* de buscadores/caminantes (inicialmente distribuidos en el espacio) y un *único* blanco.

En el marco del *trapping problem* la magnitud que es usualmente ‘optimizada’ (respecto a las tasas de transición entre los diferentes estados o tipos de movimientos) es el *Search time* (tiempo de búsqueda). En el estudio del *target problem* la magnitud analizada es la *probabilidad de supervivencia* del blanco (SP), definida como la probabilidad de que el blanco permanezca sin ser detectado hasta un tiempo t . Esta es la función que debe ser ‘optimizada’ (minimizada en este caso) en términos de las tasas de transición entre los diferentes estados del buscador/caminante.

En este capítulo mostramos que las *estrategias intermitentes* mejoran la probabilidad de detección del blanco por parte de los buscadores cuando se las compara con las búsquedas no-intermitentes o monoestado (un único modo de desplazamiento). Hallamos, además, una dependencia no-monótona (en función de los parámetros que regulan la intermitencia) de la *probabilidad de supervivencia* del blanco.

Modelamos el fenómeno de la búsqueda intermitente a partir de las *caminatas aleatorias de tiempo continuo* (CTRW) y de la teoría de *caminatas aleatorias multiestado* [56, 57, 58]. Utilizamos los conceptos de *distribución de probabilidad conjunta de un buscador*, de *probabilidad de supervivencia del blanco* y establecemos la conexión entre estas magnitudes y el *número medio de sitios distintos visitados* por un caminante.

El esquema del capítulo es el siguiente: en la próxima sección (2.2) presentamos un breve resumen de la *teoría de caminatas aleatorias multiestado* [56, 58] y las definiciones y conceptos básicos a utilizar. En la sección 2.3 describimos el modelo y presentamos la solución correspondiente para diferentes casos de interés. En la sección 2.4 mostramos las ilustraciones de los principales resultados analíticos obtenidos. Finalmente, en la sección 2.5, discutimos las conclusiones del presente capítulo.

2.2. Caminatas aleatorias multiestado: un breve resumen

Presentamos un resumen breve del formalismo de Caminatas Aleatorias Multiestado desarrollado por Weiss y Montroll [56, 57].

Consideramos que al tiempo t cada caminante puede estar en un dado sitio \vec{s} de la red, en alguno de los N estados internos caracterizados por las siguientes magnitudes:

- Probabilidad de ‘abandonar’ un estado interno: $f_i(t) dt$ es la probabilidad de partir del estado i entre t y $t + dt$, dado que el caminante arribó a ese estado en $t = 0$;
- Probabilidad de ‘mantenerse’ en un dado estado: $F_i(t) = \int_t^\infty f_i(t') dt'$ es la probabilidad de permanecer en el estado i , hasta t , dado que el caminante arribó a ese estado en $t = 0$;
- *Propagador*: $\xi_i(\vec{s}, \vec{s}'; t)$ es la probabilidad de encontrar al caminante en el sitio \vec{s} , en el estado i al tiempo t , *dado* que estuvo en \vec{s}' en el estado i al tiempo $t = 0$, *sin cambiar de estado* durante el desplazamiento.

Definimos además las siguientes funciones auxiliares,

$$h_i(\vec{s}, \vec{s}'; t) = \xi_i(\vec{s}, \vec{s}'; t) f_i(t); \quad (2.1)$$

$$H_i(\vec{s}, \vec{s}'; t) = \xi_i(\vec{s}, \vec{s}'; t) F_i(t). \quad (2.2)$$

Suponemos que en $t = 0$ el caminante se encuentra en $\vec{s} = \vec{0}$ y posee una probabilidad g_i de estar en el estado interno i . En este trabajo particularmente consideraremos dos

estados internos ($N = 2$) y asumiremos que existe invariancia traslacional en cada uno de los estados de movimiento, es decir, $\xi_i(\vec{s}, \vec{s}'; t) = \xi_i(\vec{s} - \vec{s}'; t)$.

Denotamos por $P_j(\vec{s}, t | \vec{0}, t = 0)$ a la probabilidad conjunta de estar en el sitio \vec{s} en el estado j ($j = 1, 2$), independiente del estado interno inicial. Las expresiones para estas probabilidades, en el espacio de Fourier-Laplace, vienen dadas por [56],

$$\hat{P}_1(\vec{k}, u | \vec{0}, t = 0) = \frac{g_1 \hat{H}_1(\vec{k}; u) + g_2 \hat{H}_1(\vec{k}; u) \hat{h}_2(\vec{k}; u)}{1 - \hat{h}_1(\vec{k}; u) \hat{h}_2(\vec{k}; u)}, \quad (2.3)$$

$$\hat{P}_2(\vec{k}, u | \vec{0}, t = 0) = \frac{g_2 \hat{H}_2(\vec{k}; u) + g_1 \hat{H}_2(\vec{k}; u) \hat{h}_1(\vec{k}; u)}{1 - \hat{h}_1(\vec{k}; u) \hat{h}_2(\vec{k}; u)}. \quad (2.4)$$

Las expresiones 2.3 y 2.4 son completamente generales y válidas para cualquier densidad de probabilidad de transición entre estados internos $f_j(t)$ y cualquier propagador $\xi_j(\vec{s} - \vec{s}'; t)$ del caminante en el estado interno j .

Denotaremos a las transformadas de Fourier y de Laplace (A.1) de una función de \vec{s} y t mediante un acento circunflejo sobre la misma función y cambiando su argumento al de la variable conjugada correspondiente. Por ejemplo:

$$\hat{P}(\vec{k}, u | \vec{0}, t = 0) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{-\pi}^{\pi} \dots \int_{-\pi}^{\pi} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{s}} \int_0^{\infty} e^{-ut} P(\vec{s}, t | \vec{0}, t = 0) dt d^d s \quad (2.5)$$

En lo que sigue, y a fin de obtener resultados concretos para situaciones que se presentan frecuentemente, supondremos formas explícitas para las f_j y para los propagadores ξ_j .

2.2.1. Transiciones Markovianas entre estados internos

Si elegimos para la probabilidad de transición entre estados internos una distribución del tipo Poisson (dinámica de “primer orden”):

$$f_j(t) = \gamma_j e^{-\gamma_j t}, \quad (2.6)$$

donde $j = 1, 2$, las funciones auxiliares definidas por las ecuaciones (2.1) y (2.2) toman la forma (en el espacio de Fourier-Laplace):

$$\hat{h}_i(\vec{k}, u) = \gamma_i \hat{\xi}_i(\vec{k}; u + \gamma_i), \quad (2.7)$$

$$\hat{H}_i(\vec{k}, u) = \hat{\xi}_i(\vec{k}; u + \gamma_i). \quad (2.8)$$

Por lo que,

$$\hat{P}_1(\vec{k}, u | \vec{0}, t = 0) = \frac{g_1 \hat{\xi}_1(\vec{k}; u + \gamma_1) + g_2 \hat{\xi}_1(\vec{k}; u + \gamma_1) \gamma_2 \hat{\xi}_2(\vec{k}; u + \gamma_2)}{1 - \gamma_1 \hat{\xi}_1(\vec{k}; u + \gamma_1) \gamma_2 \hat{\xi}_2(\vec{k}; u + \gamma_2)}, \quad (2.9)$$

$$\hat{P}_2(\vec{k}, u | \vec{0}, t = 0) = \frac{g_2 \hat{\xi}_2(\vec{k}; u + \gamma_2) + g_1 \hat{\xi}_1(\vec{k}; u + \gamma_1) \gamma_1 \hat{\xi}_2(\vec{k}; u + \gamma_2)}{1 - \gamma_1 \hat{\xi}_1(\vec{k}; u + \gamma_1) \gamma_2 \hat{\xi}_2(\vec{k}; u + \gamma_2)}. \quad (2.10)$$

Podemos reescribir estas ecuaciones de la siguiente forma:

$$\hat{P}_1(\vec{k}, u | \vec{0}, t = 0) = g_1 \hat{P}_{11}(\vec{k}, u | \vec{0}, t = 0) + g_2 \hat{P}_{12}(\vec{k}, u | \vec{0}, t = 0), \quad (2.11)$$

$$\hat{P}_2(\vec{k}, u | \vec{0}, t = 0) = g_1 \hat{P}_{21}(\vec{k}, u | \vec{0}, t = 0) + g_2 \hat{P}_{22}(\vec{k}, u | \vec{0}, t = 0), \quad (2.12)$$

donde $P_{ij}(\vec{s}, t | \vec{0}, t = 0)$ es la probabilidad conjunta de que el caminante esté en el sitio \vec{s} con estado interno i al tiempo t , dado que en $t = 0$ estuvo en el sitio $\vec{s} = \vec{0}$ en el estado interno j .

2.2.2. Propagadores tipo CTRW

Si los desplazamientos para cada estado interno son modelados a través de *caminatas aleatorias de tiempo continuo* (CTRW), los propagadores (en el espacio de Fourier-Laplace) pueden expresarse como:

$$\hat{\xi}_j(\vec{k}; u) = \frac{1 - \hat{\Psi}_j(\vec{k} = \vec{0}; u)}{u [1 - \hat{\Psi}_j(\vec{k}; u)]} \quad (j = 1, 2), \quad (2.13)$$

donde $\Psi_i(\vec{s}, t)$ identifica la densidad de probabilidad de que el caminante realice una transición al sitio \vec{s} entre t y $t + dt$ dado que arribó al sitio $\vec{0}$ en $t = 0$ sin haber cambiado su estado interno y $\Psi_i(t) = \sum_{\vec{s}} \Psi_i(\vec{s}, t)$ es la densidad de probabilidad que el caminante realice una transición hacia *algún* sitio entre t y $t + dt$ dado que arribó al sitio $\vec{0}$ en $t = 0$ sin haber cambiado su estado interno. En el caso de densidades *separables* [56, 57] en el espacio y el tiempo, tenemos que: $\hat{\Psi}_j(\vec{k}; u) = \psi_j(u) p_j(\vec{k})$, donde $\psi_j(u)$ es la transformada de Laplace de la *densidad del tiempo de pausa* [56] y $p_i(\vec{k})$ es el “factor de estructura” de la caminata aleatoria en la red subyacente.

2.3. El modelo: ‘Búsqueda intermitente de un blanco’

En esta sección presentamos el modelo para la *búsqueda intermitente de un blanco*. Si bien el sistema que utilizaremos es una cadena infinita, el enfoque analítico es de validez general y susceptible de ser aplicado tanto en dimensiones mayores como en dominios finitos. Dado que limitaremos el cálculo a una cadena (red 1D), abandonamos la notación vectorial. Suponemos que existe un *único* blanco fijo localizado en el origen y un *conjunto* de buscadores inicialmente distribuidos en forma uniforme a lo largo de la cadena (ρ denota la probabilidad de ocupación inicial de cada sitio). La ‘búsqueda’ comienza en $t = 0$ y cuando algún caminante (buscador) encuentra el blanco, lo atrapa con probabilidad uno (atrapamiento perfecto) y el ‘proceso de búsqueda’ se termina.

En forma similar a lo expuesto en la referencia [30], suponemos que cada caminante realiza un movimiento difusivo en la red con dos tipos de desplazamiento (estados) entre los cuales *alterna*. En uno de estos estados el buscador explora diferentes regiones de la

red y en el otro realiza una búsqueda minuciosa (o exploración compacta) del área circundante. El esquema o estrategia *intermitente* consiste en elegir tasas de transición entre los estados internos ‘adecuadas’ con el fin de mejorar la ‘detección’. La razón por la cual una *estrategia intermitente* puede ser más eficaz que la difusión en uno solo de los estados es que desplazamientos de mayor longitud permiten alejarse de una región bien explorada y otorgan la posibilidad de visitar las cercanías del blanco. Así que una combinación de ambos tipos de desplazamientos *optimizan* el proceso de detección. Modelamos los estados en la siguiente forma:

- **Estado 1:** Random Walk simétrico con saltos a segundos vecinos y frecuencia λ_1 . Este es un estado de desplazamiento (o relocalización) pero con posibilidad de captura al llegar a destino.
- **Estado 2:** Random Walk simétrico con saltos a primeros vecinos y frecuencia λ_2 . En este estado se realiza una exploración local (o búsqueda minuciosa).

Consideramos un CTRW separable (sección 2.2.2). La transformada de Laplace de la *densidad del tiempo de pausa* j -ésima para una distribución del tipo Poisson es: $\psi_j(u) = \lambda_j / \lambda_j + u$. Las $f_j(t)$ vienen dadas por la ecuación (2.6) y los factores de estructura para la cadena son $p_1(k) = \cos(2k)$ y $p_2(k) = \cos(k)$.

La *optimización* de la estrategia intermitente de búsqueda consiste en hallar los valores γ_j tales que la *probabilidad de supervivencia* del blanco al tiempo t sea *mínima*. La probabilidad de supervivencia [30, 56, 57, 58], $\Phi(t)$, puede ser escrita como $\Phi(t) = e^{-\rho S(t)}$. $S(t)$ identifica el *número medio de sitios distintos visitados* hasta el tiempo t . Dada la definición de $\Phi(t)$, resulta evidente que maximizar $S(t)$ es equivalente a minimizar la SP. Para el *target problem* puede mostrarse ([58]) que la relación entre la probabilidad condicional, $P_{Mar}(s, t|0, t=0)$ y el *número medio de sitios distintos visitados*, $S_{Mar}(t)$, viene dada por

$$\hat{S}_{Mar}(u) = \frac{1}{u^2 \hat{P}_{Mar}(s=0, u|0, t=0)}. \quad (2.14)$$

$P_{Mar}(s, t|0, t=0) = P_1(s, t|0, t=0) + P_2(s, t|0, t=0)$ es la probabilidad *marginal* de encontrar al buscador en el sitio s al tiempo t independiente de su estado interno. Si la ‘detección’ del blanco ocurre solo en *uno* de los dos estados internos (suponemos que sea el *estado-2*), la probabilidad de supervivencia $\Phi(t)$ puede escribirse como $\Phi_2(t) = e^{-\rho S_2(t)}$, donde

$$\hat{S}_2(u) = \frac{1}{u} \frac{g_1 \hat{P}_{21}(k=0, u|0, t=0) + g_2 \hat{P}_{22}(k=0, u|0, t=0)}{\hat{P}_{22}(s=0, u|0, t=0)}. \quad (2.15)$$

Sujetos a las condiciones impuestas para las transiciones entre estados y para la propagación en cada uno de ellos, obtenemos las siguientes expresiones para las transformadas

de Fourier-Laplace de las probabilidades $P_{ij}(\vec{s}, t | \vec{0}, t = 0)$,

$$\begin{aligned}\hat{P}_{11}(k, u | 0, t = 0) &= \frac{u + \gamma_2 - \lambda_2(p_2(k) - 1)}{D(k; u, \gamma_1, \gamma_2)} \\ \hat{P}_{12}(k, u | 0, t = 0) &= \frac{\gamma_2}{D(k; u, \gamma_1, \gamma_2)}\end{aligned}\tag{2.16}$$

$$\begin{aligned}\hat{P}_{21}(k, u | 0, t = 0) &= \frac{\gamma_1}{D(k; u, \gamma_1, \gamma_2)} \\ \hat{P}_{22}(k, u | 0, t = 0) &= \frac{u + \gamma_1 - \lambda_1(p_1(k) - 1)}{D(k; u, \gamma_1, \gamma_2)}\end{aligned}$$

O en el caso de la *probabilidad marginal* $P_{Mar}(s, t | 0, t = 0)$,

$$\hat{P}_{Mar}(k, u | 0, t = 0) = \frac{N(k; u, \gamma_1, \gamma_2)}{D(k; u, \gamma_1, \gamma_2)}\tag{2.17}$$

donde

$$\begin{aligned}N(k; u, \gamma_1, \gamma_2) &= g_1(u - \lambda_2(p_2(k) - 1)) + g_2(u - \lambda_1(p_1(k) - 1)) + (\gamma_1 + \gamma_2) \\ D(k; u, \gamma_1, \gamma_2) &= (u + \gamma_2 - \lambda_2(p_2(k) - 1))(u + \gamma_1 - \lambda_1(p_1(k) - 1)) - \gamma_1\gamma_2.\end{aligned}$$

Evaluamos las probabilidades $\hat{P}_{ij}(s, u | 0, t = 0)$ ($P_{Mar}(k, u | 0, t = 0)$) a través de la transformación inversa

$$\hat{P}_{ij}(s, u | 0, t = 0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \hat{P}_{ij}(k, u | 0, t = 0) e^{iks} dk.\tag{2.18}$$

En lo que sigue, y con el fin de simplificar el tratamiento analítico, suponemos $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$, lo que nos permite escalar (apéndice B) los γ_j en términos de este parámetro.

2.3.1. Antitransformada de Fourier: solución exacta

En este apartado presentamos en forma detallada el cálculo de la probabilidad marginal $\hat{P}_{Mar}(s, u | s_0, t = 0)$. Debemos evaluar a tal fin la siguiente integral:

$$\begin{aligned}\hat{P}_{Mar}(s, u | 0, t = 0) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \hat{P}_{Mar}(k, u | 0, t = 0) e^{iks} dk \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{N(k; u, \gamma_1, \gamma_2)}{D(k; u, \gamma_1, \gamma_2)} e^{iks} dk\end{aligned}\tag{2.19}$$

donde

$$\hat{P}_{Mar}(k, u | 0, t = 0) = \frac{g_1(u - \lambda(p_2(k) - 1)) + g_2(u - \lambda(p_1(k) - 1)) + (\gamma_1 + \gamma_2)}{(u + \gamma_2 - \lambda(p_2(k) - 1))(u + \gamma_1 - \lambda(p_1(k) - 1)) - \gamma_1\gamma_2}\tag{2.20}$$

Utilizando que $p_1(k) = \cos 2k$, $p_2(k) = \cos k$ y definiendo $x(k) = \cos k - 1$ llevamos la ecuación (2.19) a la forma,

$$\hat{P}_{Mar}(s, u|0, t = 0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{(u + \gamma_1 + \gamma_2) - g_1 x - 2g_2 x(x + 2)}{2(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)} e^{iks} dk \quad (2.21)$$

Los x_i son las raíces de $D(k; u, \gamma_1, \gamma_2) = 2(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)$, las cuales son obtenidas a partir de procedimientos convencionales [59].

Calculamos $\hat{P}_{Mar}(0, u|0, t = 0)$; (el cálculo para $s \neq 0$ se puede llevar a cabo sin mayores complicaciones); expandiendo (2.21) en fracciones parciales: $[2(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)]^{-1} = C_1(x - x_1)^{-1} + C_2(x - x_2)^{-1} + C_3(x - x_3)^{-1}$ con $C_1 = [2(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)]^{-1}$, $C_2 = [2(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)]^{-1}$, $C_3 = [2(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)]^{-1}$, utilizando las definiciones dadas y algunas relaciones trigonométricas obtenemos:

$$\hat{P}_{Mar}(0, u|0, t = 0) = \frac{1}{\pi} \sum_j C_j \int_0^{\pi} \frac{(u + \gamma_1 + \gamma_2 + 1) - g_1 \cos(k) - 2g_2 \cos(2k)}{(\cos(k) - (1 + x_j))} dk \quad (2.22)$$

o $\hat{P}_{Mar}(0, u|0, t = 0) = \sum_j I_j$ donde,

$$I_j = \frac{C_j}{\pi} \int_0^{\pi} \frac{(u + \gamma_1 + \gamma_2 + 1) - g_1 \cos(k) - 2g_2 \cos(2k)}{(\cos(k) - (1 + x_j))} dk \quad (2.23)$$

Utilizamos en este punto la integral tabulada:

$$\frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \frac{\cos(ny)}{a + b \cos(y)} dy = \frac{1}{\sqrt{a^2 - b^2}} \left[\frac{\sqrt{a^2 - b^2} - a}{b} \right]^{|n|} \quad (2.24)$$

expresión válida para $n \in \mathbb{Z}$ si $a > |b| > 0$. Asignando $b = \mp 1$ y $a = \pm(x_j + 1)$ (donde los signos se corresponden con x_1, x_2 (-,+) y x_3 (+,-) respectivamente) obtenemos, si $j_+ = 1, 2$ y $j_- = 3$, que:

$$I_{j\pm} = \mp \frac{C_j}{2\pi \sqrt{(1 + x_j)^2 - 1}} \left\{ (u + \gamma_1 + \gamma_2 + 1) - g_1 [(1 + x_j) \mp \sqrt{(1 + x_j)^2 - 1}] - g_2 [(1 + x_j) \mp \sqrt{(1 + x_j)^2 - 1}]^2 \right\} \quad (2.25)$$

La antitransformada buscada es entonces: $\hat{P}_{Mar}(0, u|0, t = 0) = \sum_j^3 I_{j\pm}$.

2.3.2. Antitransformada de Fourier: alta tasa de transiciones entre estados internos ($(\gamma_1 + \gamma_2) \gg 1$)

En esta sección calculamos $\hat{P}_{Mar}(s, u|0, t = 0)$ en el regimen $(\gamma_1 + \gamma_2) \gg 1$. Este análisis nos permite reobtener resultados conocidos ([30]) como un caso particular del presente enfoque.

Definiendo $A_1 = \lambda(\cos 2k - 1)$ y $A_2 = \lambda(\cos k - 1)$, y “escaleando” en λ , podemos reescribir $\hat{P}_{Mar}(k, u|0, t = 0)$ en la forma:

$$\hat{P}_{Mar}(k, u|0, t = 0) = \frac{1 + \frac{u}{\gamma_1 + \gamma_2} - \frac{\theta_1 A_2 + \theta_2 A_1}{\gamma_1 + \gamma_2}}{\frac{(u - A_2)(u - A_1)}{\gamma_1 + \gamma_2} + \frac{\gamma_1(u - A_2)}{\gamma_1 + \gamma_2} + \frac{\gamma_2(u - A_1)}{\gamma_1 + \gamma_2}}. \quad (2.26)$$

En el límite considerado:

$$\begin{aligned} \hat{P}_{Mar}(k, u|0, t = 0) &\simeq \frac{1 + \frac{u}{\gamma_1 + \gamma_2}}{\frac{\gamma_1}{\gamma_1 + \gamma_2}(u - A_2) + \frac{\gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2}(u - A_1)} \\ \hat{P}_{Mar}(k, u|0, t = 0) &\simeq \frac{1 + \frac{u}{\gamma_1 + \gamma_2}}{(1 + u) - \left(\frac{\gamma_1}{\gamma_1 + \gamma_2}\right) \cos(k) - \left(\frac{\gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2}\right) \cos(2k)} \end{aligned} \quad (2.27)$$

Considerando además $u \ll \gamma_1 + \gamma_2$ resulta:

$$\hat{P}_{Mar}(k, u|0, t = 0) = \frac{1}{(1 + u) - \left(\frac{\gamma_1}{\gamma_1 + \gamma_2}\right) \cos(k) - \left(\frac{\gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2}\right) \cos(2k)} \quad (2.28)$$

de lo cual obtenemos

$$\hat{P}_{Mar}(s, u|0, t = 0) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{\cos(ks)}{(1 + u) - \left(\frac{\gamma_1}{\gamma_1 + \gamma_2}\right) \cos(k) - \left(\frac{\gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2}\right) \cos(2k)} dk. \quad (2.29)$$

Definiendo $\alpha = \frac{\gamma_1}{\gamma_2 + \gamma_1}$ y $z = \frac{1}{u + 1}$ llevamos la última integral a la forma:

$$P_{Mar}(s, u|0, t = 0) = \frac{z}{\pi} \int_0^\pi \frac{\cos(ks)}{1 - z[\alpha \cos(k) + (1 - \alpha) \cos(2k)]} dk \quad (2.30)$$

Esta expresión límite es similar a la obtenida en la ecuación (4.4) de la referencia [30] hallada en el esquema de caminatas aleatorias de tiempo discreto.

Utilizando la relación $\cos 2k = 2 \cos^2 k - 1$ en la ecuación (2.30):

$$\hat{P}_{Mar}(s, u|0, t = 0) = \frac{z}{\pi} \int_0^\pi \frac{\cos(ks)}{-2z(1 - \alpha) \cos^2(k) - z\alpha \cos(k) + (1 + z(1 - \alpha))} dk \quad (2.31)$$

$$\hat{P}_{Mar}(s, u|0, t = 0) = \frac{z}{\pi} \int_0^\pi C_1 \frac{\cos(ks)}{(\cos(k) - x_1)} + C_2 \frac{\cos(ks)}{(\cos(k) - x_2)} dk \quad (2.32)$$

donde $C_1 = -C_2 = (x_1 - x_2)^{-1}$ y

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{-z\alpha + \sqrt{z^2 - 2z^2(1 - \alpha) + 9z^2(1 - \alpha)^2 + 8z(1 - \alpha)}}{4z(1 - \alpha)} \\ x_2 &= \frac{-z\alpha - \sqrt{z^2 - 2z^2(1 - \alpha) + 9z^2(1 - \alpha)^2 + 8z(1 - \alpha)}}{4z(1 - \alpha)} \end{aligned}$$

Para resolver la ecuación (2.32) nos valemos de la integral de la sección anterior (ecuación 2.24), en este caso $b = \pm 1$ y $a = x_1, -x_2$ respectivamente.

2.3.3. Teoremas Tauberianos en el regimen $(\gamma_1 + \gamma_2) \gg 1$

En secciones anteriores hemos calculado en forma aproximada y exacta $\hat{P}_{Mar}(s, u|0, t = 0)$, el paso siguiente consiste en encontrar el *número medio de sitios distintos visitados* en la red hasta el tiempo t , $S(t)$. Las expresiones a utilizar son las obtenidas en la sección anterior para $P_{Mar}(0, u|0, t = 0)$ (o las $P_{ij}(0, u|0, t = 0)$ cuando corresponda) y la antitransformada buscada es:

$$S(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{u_0 - i\infty}^{u_0 + i\infty} \frac{1}{u^2 P(0, u|0, t = 0)} e^{ut} du \quad (2.33)$$

La solución de la integral (2.33) en forma analítica se torna muy complicada por lo que recurrimos a métodos numéricos para su inversion [60].

Es posible, sin embargo, obtener en forma analítica propiedades asintóticas de $P_{Mar}(0, t|0, t = 0)$ (y consecuentemente de $S(t)$) a partir de los llamados teoremas Tauberianos (ver apéndice A.2), los cuales relacionan los comportamientos asintóticos:

$$\lim_{u \rightarrow 0} \hat{P}_{Mar}(0, u|0, t = 0) \rightarrow \lim_{t \rightarrow \infty} P_{Mar}(0, t|0, t = 0)$$

En el siguiente apartado esbozamos los resultados obtenidos, tanto para $\hat{P}_{Mar}(0, u|0, t = 0)$ como para $S_{Mar}(t)$.

Tauberianos en el régimen de altas transiciones

Utilizando las definiciones de la sección 2.3.2 y teniendo en cuenta que $u \ll 1$ es posible reescribir $\hat{P}_{Mar}(0, u|0, t = 0)$ en la forma:

$$\hat{P}_{Mar}(0, u|0, t = 0) \simeq \frac{1}{4 - 3\alpha} \left\{ \sqrt{\frac{4 - 3\alpha}{2}} \frac{1}{\sqrt{u}} + \frac{(1 - \alpha)}{\sqrt{(4 - 3\alpha)\alpha + \frac{(1 - \alpha)(2 - \alpha)u}{(4 - 3\alpha)}}} \right\} \quad (2.34)$$

Notemos que esta expresión toma idéntico valor para $\alpha = 0$ y $\alpha = 1$. Considerando $\alpha \neq 0$ en forma estricta (para evitar la competencia entre los factores en la segunda raíz de (2.34)) escribimos:

$$P_{Mar}(0, u|0, t = 0) \sim \frac{1}{4 - 3\alpha} \left\{ C \frac{1}{\sqrt{u}} + (1 - \alpha) A(1 + Bu) \right\} \quad (2.35)$$

donde, $A = \frac{2}{\sqrt{\alpha(4 - 3\alpha)}}$, $B = \frac{4(1 - \alpha)(2 - \alpha)}{\alpha(4 - 3\alpha)^2}$ y $C = \sqrt{\frac{4 - 3\alpha}{2}}$. Recordando que $\hat{S}(u) = 1/u^2 \hat{P}(0, u|0, t = 0)$, y expandiendo nuevamente en u tenemos:

$$\hat{S}_{Mar}(u) \sim \frac{(4 - 3\alpha)}{C} \frac{1}{u^{3/2}} - \frac{\alpha(4 - 3\alpha)A}{C^2} \frac{1}{u}.$$

Utilizando los resultados del apartado A.2 obtenemos finalmente :

$$S_{Mar}(t) \sim \frac{2\sqrt{2(4-3\alpha)}}{\sqrt{\pi}} t^{1/2} - \frac{4(1-\alpha)}{\sqrt{\alpha(4-3\alpha)}} \quad (\alpha \neq 0, t \gg 1)$$

o

$$S_{Mar}(t) \sim 2\sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{\frac{\gamma_1 + 4\gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2}} t^{1/2} - 4 \frac{\gamma_2}{\sqrt{\gamma_1(\gamma_1 + 4\gamma_2)}}. \quad (2.36)$$

En la ecuación (2.36) hemos reescrito los resultados en términos de los parámetros originales de transición γ_1 y γ_2 .

2.3.4. Ausencia de transiciones entre estados ($\gamma_1 = \gamma_2 = 0$): ‘búsqueda monoestado’

Presentamos a continuación los resultados correspondientes a la ‘búsqueda monoestado’ (un sólo modo de desplazamiento). En particular, si no existen transiciones entre estados, es de esperar que la $P_{Mar}(k, u|0, t = 0)$ represente la evolución independiente de caminantes en cada uno de los estados internos:

$$\hat{P}_{Mar}(k, u|0, t = 0) = \frac{g_1(u - \lambda(p_2(k) - 1)) + g_2(u - \lambda(p_1(k) - 1))}{(u - \lambda(p_1(k) - 1))(u - \lambda(p_2(k) - 1))}$$

o

$$\hat{P}_{Mar}(k, u|0, t = 0) = \frac{g_1}{(u - \lambda(p_1(k) - 1))} + \frac{g_2}{(u - \lambda(p_2(k) - 1))}$$

En el esquema de ‘búsqueda monoestado’ el número medio de sitios distintos visitados resulta:

$$\hat{S}_{mono}(u) = \frac{1}{u^2 P_{11}(0, u|0, t = 0)}. \quad (2.37)$$

La expresión correspondiente (obtenida de 2.37) en el dominio temporal es,

$$\begin{aligned} S_{mono}(t) &= 1 + \int_0^t e^{-t'} \cdot (I_0(t') + I_1(t')) dt' \\ &= [I_0(t) (2t + 1) + 2t I_1(t)] e^{-t} \end{aligned} \quad (2.38)$$

donde $I_v(t)$ es la función modificada de Bessel de orden v . Se puede demostrar que $\hat{P}_{11}(s = 0, u|0, t = 0) = \hat{P}_{22}(s = 0, u|0, t = 0)$, y por lo tanto, $\hat{S}_{mono}(u)$ es la misma para transiciones a primeros y a segundos vecinos.

2.4. Ilustraciones

En esta sección presentamos resultados de secciones anteriores y comentamos algunas ideas generales para su interpretación. Las expresiones analíticas fueron obtenidas en el espacio de Laplace y sus antitransformadas evaluadas numéricamente [60]. Para mostrar los resultados en forma clara fijamos algunos parámetros: tomamos como condiciones iniciales $g_1 = g_2 = 1/2$, medimos los tiempos en unidades de la constante de difusión (λ) y elegimos una concentración de caminantes $\rho = 0.1$.

Recordamos que estamos interesados en estudiar la posible maximización de $S(t)$ para una adecuada elección de los parámetros de transición entre estados γ_i , de forma tal que la **Probabilidad de Supervivencia** del blanco a un tiempo t , $\Phi(t) = e^{-\rho S(t)}$ sea **mínima**. Para analizar el comportamiento de $S(t)$ generamos la superficie $S(\gamma_1, \gamma_2; t_0)$, tanto para el caso de captura en ambos estados (S_{Mar}) como para el de captura en un estado (S_2). Presentamos también las curvas correspondientes a cortes en la superficie $S(\gamma_1, \gamma_2; t_0)$ y a la probabilidad de supervivencia Φ . A partir de las mismas podemos observar que no obtenemos un par único (γ_1, γ_2) que maximice el *número de sitios distintos visitados* (o minimice la SP) sino una región apreciable por su color (un color más oscuro implica un valor mayor de $S(\gamma_1, \gamma_2; t_0)$). Una característica a tener en cuenta es que la región en la

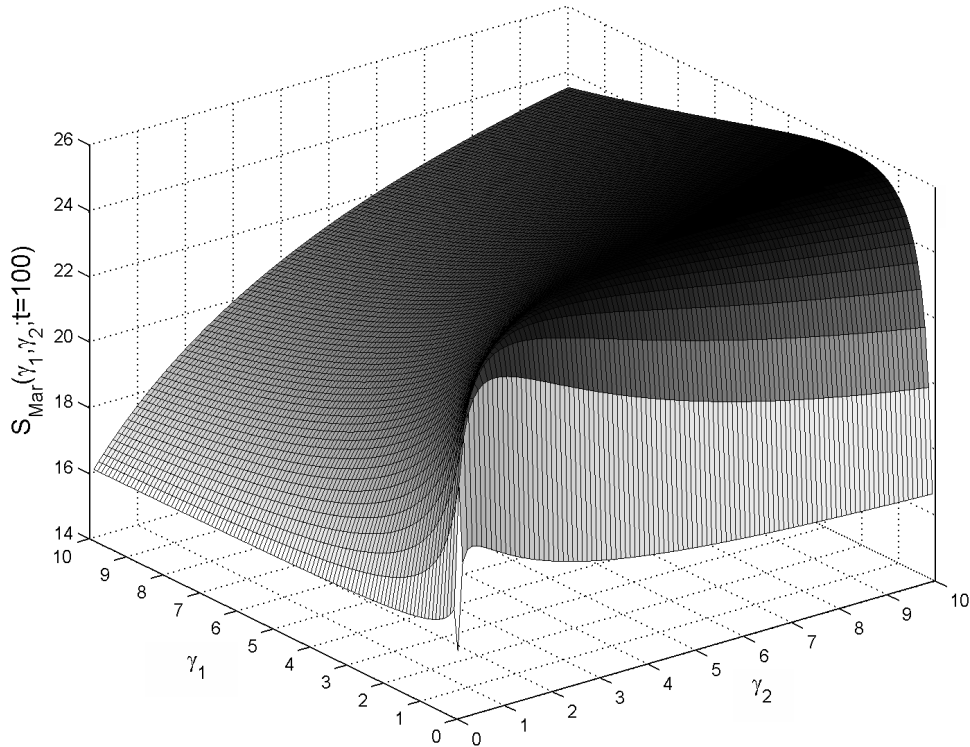


Figura 2.1: $S_{Mar}(\gamma_1, \gamma_2; t = 100)$, Número medio de sitios distintos visitados para el caso marginal (la captura se produce en cualquiera de los estados) como función de las tasas de transición γ_1 y γ_2 .

cual se localizan las tasas de transiciones óptimas se encuentra “volcada” sobre uno de los ejes, el correspondiente a γ_2 . Esto indica un tiempo de permanencia mayor ($T_i = 1/\gamma_i$ es el tiempo medio de permanencia en el estado i) en el estado de saltos a segundos vecinos o estado de relocalización.

En la figura 2.1 presentamos la superficie $S_{Mar}(\gamma_1, \gamma_2; t)$ para un tiempo fijo ($t = 100$). En la misma observamos que la estrategia intermitente de búsqueda mejora (maximiza) sustancialmente el *número medio de sitios distintos visitados* comparado con la *búsqueda monoestado* ($\gamma_1 = \gamma_2 = 0$).

A partir de la figura queda en evidencia la región de valores óptimos en el espacio de parámetros (γ_1, γ_2) . Esta región puede ser apreciada por el tono más oscuro en la escala de grises (un gris más oscuro indica un valor mayor de $S_{Mar}(\gamma_1, \gamma_2; t)$). Resaltamos que dado un valor de γ_1 (para un valor fijo de t), podemos seleccionar γ_2 de forma que $S_{Mar}(\gamma_1, \gamma_2; t)$ sea máxima (y viceversa).

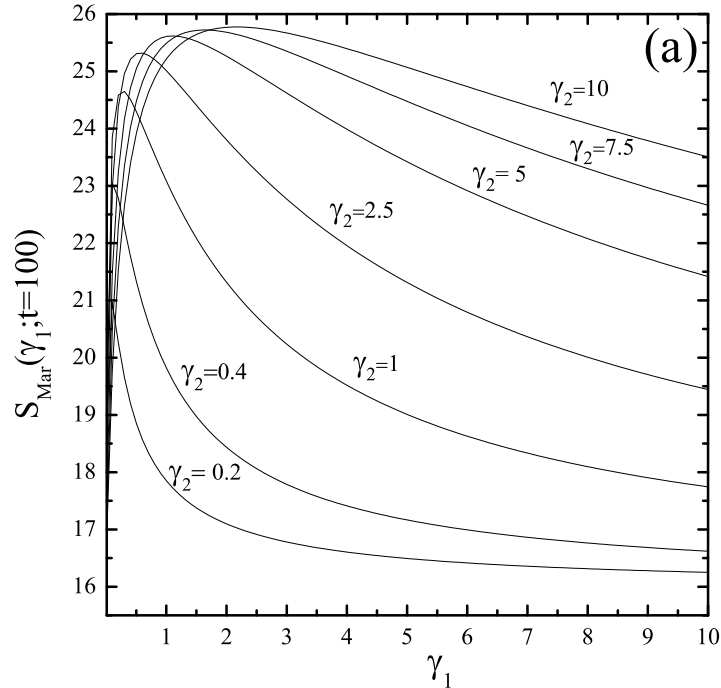


Figura 2.2: **(a)** Secciones de $S_{Mar}(\gamma_1, \gamma_2 = cte; t)$ vs γ_1 . Las curvas corresponden a cortes de la superficie en la figura 2.1

Las curvas mostradas en la figura 2.2 **(a)** corresponden a cortes en la superficie de la figura 2.1, con $\gamma_2 = cte$ y las curvas mostradas en la figura 2.2 **(b)** corresponden a la *probabilidad de supervivencia* del blanco $\Phi_{Mar}(\gamma_1; t) = e^{-\rho S_{Mar}(\gamma_1; t)}$. $S_{Mar}(\gamma_1; t)$ identifica las curvas presentadas en **(a)**. En la misma observamos que para un valor fijo de γ_2 , siempre podemos encontrar un mínimo como función de γ_1 , es decir que, a un tiempo fijo t podemos optimizar la ‘búsqueda’. Para una elección adecuada de las tasas de transición, obtenemos una reducción importante ($\sim 50\%$) en la *probabilidad de supervivencia*.

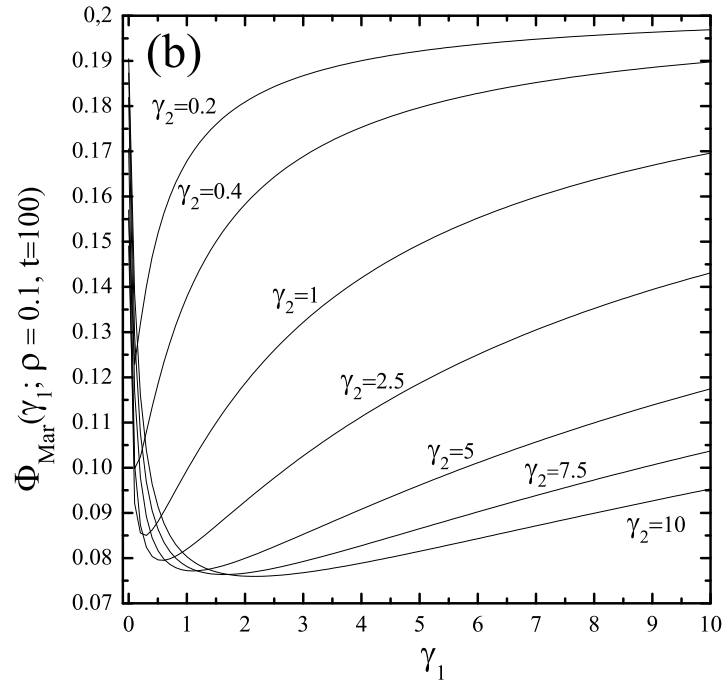


Figura 2.2: **(b)** Curvas correspondientes a la probabilidad de supervivencia $\Phi_{Mar}(\gamma_1; t) = e^{-\rho S_{Mar}(\gamma_1; t)}$. $S_{Mar}(\gamma_1; t)$ corresponde a las curvas presentadas en 2.2 **(a)**

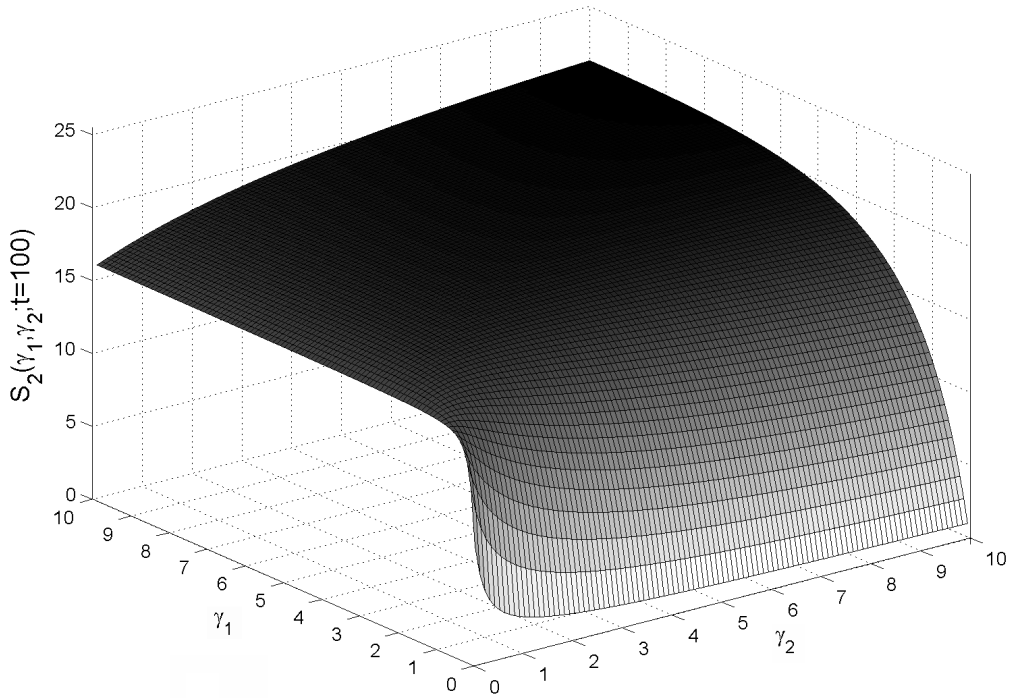


Figura 2.3: Número medio de sitios distintos visitados, $S_2(\gamma_1, \gamma_2; t = 100)$, como función de γ_1 y γ_2 , cuando la captura es posible *solo* en el estado 2.

En la figura 2.3 mostramos el comportamiento del *número medio de sitios distintos visitados* cuando la captura es *sólo* posible en el estado 2, $S_2(\gamma_1, \gamma_2; t)$. En la misma observamos que, también en este caso, es posible obtener una mejora en la detección eligiendo los valores adecuados de (γ_1, γ_2) . Recordando que $T_1 = 1/\gamma_1$ es el tiempo medio de estadía en el estado 1, el límite $\gamma_1 \rightarrow 0$ muestra el comportamiento esperado, $S_2(\gamma_1, \gamma_2; t) \rightarrow 0$.

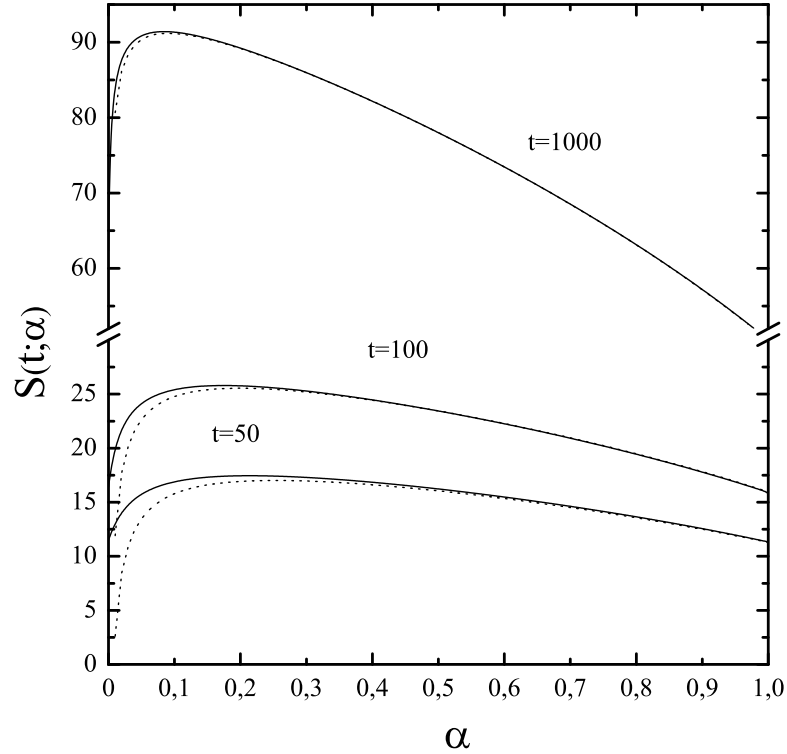


Figura 2.4: $S_{Mar}(t; \alpha)$ vs α para diferentes tiempos $t = 50, 100, 1000$. Las curvas continuas corresponden a resultados de la sección 2.3.2 y las curvas en líneas de puntos a resultados de la sección 2.3.3.

En la figura 2.4 mostramos el *número medio de sitios distintos visitados*, S_{Mar} , para tres tiempos diferentes: $t = 50, 100, 1000$, como función del parámetro α . Presentamos en la misma resultados-analíticos numéricos obtenidos del esquema de *alta tasa de transiciones entre estados internos* (sección 2.3.2). A modo de comparación también incluimos en la figura curvas correspondientes a resultados analíticos obtenidos mediante los teoremas tauberianos en el límite de *alta tasa de transiciones entre estados internos* (sección 2.3.3). En la figura observamos que para *maximizar* la probabilidad de captura el caminante/buscador debe permanecer un ‘tiempo mayor’ ($\alpha \sim 0$) en el estado de relocalización (estado 1). El valor del parámetro α que maximiza $S_{Mar}(t; \alpha)$, a un tiempo fijo t , define la relación adecuada entre γ_1 y γ_2 para ‘optimizar’ la estrategia de búsqueda.

2.5. Conclusiones del capítulo

En el presente capítulo hemos presentado un modelo resoluble en forma analítica para la *búsqueda intermitente* de un blanco que permanece fijo en el origen de una cadena. El modelo está sustentado en dos formalismos básicos: *Las Caminatas Aleatorias de Tiempo Continuo CTRW* y la teoría de *Transporte Multiestado* propuesto por Weiss [56]. Ambos formalismos fueron necesarios para desarrollar la propuesta innovadora de este trabajo: *La Optimización de las Estrategias de Búsqueda Intermitentes y su desarrollo en tiempo continuo*.

Caracterizamos el esquema *intermitente* (alternancia entre los estados o *fases* de búsqueda) mediante funciones de densidad del tipo exponencial de parámetros γ_1 y γ_2 (dinámica de primer orden), aunque el enfoque teórico propuesto es general. Evaluamos el *número medio de sitios distintos visitados* por el caminante en función de las tasas de transición, cuando la captura se produce en uno o en los dos estados, mostrando que la *probabilidad de supervivencia* del blanco es una función no-monótona (optimizable) de γ_1 y γ_2 . Los resultados obtenidos demuestran que siempre es posible encontrar tasas de transiciones entre estados que optimicen la localización o encuentro y mejoren la detección comparada con la búsqueda monoestado.

Si bien el modelo presenta simplificaciones a las situaciones reales ($1D$, y 2 estados posibles para el caminante, saltos a 1^{ros} y 2^{dos} vecinos) los resultados obtenidos muestran una fenomenología muy interesante para el análisis. Por este motivo podemos considerar nuestro planteo como una primera aproximación para modelos más complejos y realistas.

Con este trabajo se ha contribuido al desarrollo de un tema de reciente aparición en la literatura y en el cual las interpretaciones de los resultados obtenidos resultan, hasta el presente, un tanto confusas. Hemos desarrollado un modelo claro para interpretar el concepto de *Intermitencia* [30] en los fenómenos de localización de blancos. Existe un gran número de posibles extensiones de este trabajo, las cuales desarrollamos en capítulos siguientes.

Capítulo 3

Búsqueda intermitente de blancos: relocalización y desplazamientos sesgados

3.1. Introducción

En el capítulo 2 ([48]) presentamos el modelo inicial para la cinética de búsqueda *intermitente* de un blanco en el marco del *target problem*. En este esquema, un conjunto de buscadores distribuidos inicialmente en el espacio, intenta localizar el blanco que suele suponerse estático. La magnitud fundamental definida en el *target problem* es la *probabilidad de supervivencia* (SP): la probabilidad de que el blanco permanezca sin ser detectado hasta un tiempo t ([48]). Hemos demostrado (Cap. 2) que la SP puede ser optimizada en función de las tasas de transición entre los estados de desplazamientos de los buscadores (esquema intermitente).

En este capítulo retomamos el *target problem*, extendiendo el modelo original (2) para incorporar diferentes ‘comportamientos de búsqueda’. Consideramos en primera instancia la longitud del desplazamiento y seguidamente el efecto que tiene la introducción de una asimetría (sesgo) para el desplazamiento en el esquema de búsqueda. Llevamos adelante esta propuesta utilizando la *teoría de caminatas aleatorias multiestado* desarrollada por Montroll y Weiss [56, 57].

El resumen del capítulo es el siguiente: en la sección (3.2) incluimos los resultados de la *teoría de caminatas aleatorias multiestado* que nos serán de utilidad, las definiciones y conceptos básicos a utilizar. En la sección 3.3 describimos el modelo y su solución analítica. En la sección 3.4 presentamos las ilustraciones correspondientes a los principales resultados analíticos obtenidos y los comparamos con simulaciones tipo Monte Carlo. Finalmente, en la sección 3.5 discutimos las conclusiones del presente capítulo.

3.2. Algunos resultados de la teoría de caminatas aleatorias multiestado

Presentamos un breve resumen de los resultados obtenidos a partir del formalismo desarrollado por Weiss y Montroll [56, 57, 48]. Consideramos que al tiempo t cada caminante puede estar en un dado sitio s de una cadena (red $1D$) y en alguno de los dos estados internos que lo caracteriza ($i = 1, 2$). Para las transiciones entre estos estados internos suponemos una dinámica de “primer orden” con parámetros γ_1 y γ_2 . Tomamos como condiciones iniciales ($t = 0$) $s = 0$ y una probabilidad g_i ($i = 1, 2$) de estar en el estado i . A partir de estas suposiciones podemos escribir la probabilidad conjunta de estar en el sitio s , en el estado interno j ($j = 1, 2$) al tiempo t como,

$$P_1(s, t|0, t = 0) = g_1 P_{11}(s, t|0, t = 0) + g_2 P_{12}(s, t|0, t = 0), \quad (3.1)$$

$$P_2(s, t|0, t = 0) = g_1 P_{21}(s, t|0, t = 0) + g_2 P_{22}(s, t|0, t = 0). \quad (3.2)$$

$P_{ij}(s, t|0, t = 0)$ es la probabilidad conjunta de estar en el sitio s en el estado interno i al tiempo t dado que estuvo en $s = 0$, con estado interno j al tiempo $t = 0$. A partir del formalismo de Montroll y Weiss se encuentran en forma analítica -en el espacio de Fourier (k) - Laplace (u)- expresiones para las $P_{ij}(s, t|0, t = 0)$.

Obtenemos las siguientes expresiones para las transformadas de Fourier-Laplace de las probabilidades conjuntas:

$$\begin{aligned} \hat{P}_{11}(k, u|0, t = 0) &= \frac{u + \gamma_2 - \lambda_2(p_2(k) - 1)}{D(k, u)} \\ \hat{P}_{12}(k, u|0, t = 0) &= \frac{\gamma_2}{D(k, u)} \\ \hat{P}_{21}(k, u|0, t = 0) &= \frac{\gamma_1}{D(k, u)} \\ \hat{P}_{22}(k, u|0, t = 0) &= \frac{u + \gamma_1 - \lambda_1(p_1(k) - 1)}{D(k, u)} \end{aligned}$$

donde

$$D(k, u) = (u + \gamma_2 - \lambda_2(p_2(k) - 1))(u + \gamma_1 - \lambda_1(p_1(k) - 1)) - \gamma_1\gamma_2,$$

$p_j(k)$ es el factor de estructura de la cadena para el estado j y λ_i es el coeficiente de difusión en el estado i .

Recordamos que denotamos las transformadas de Fourier y de Laplace de una función de s y t mediante un acento circunflejo sobre la misma función y cambiando su argumento al de la variable conjugada correspondiente.

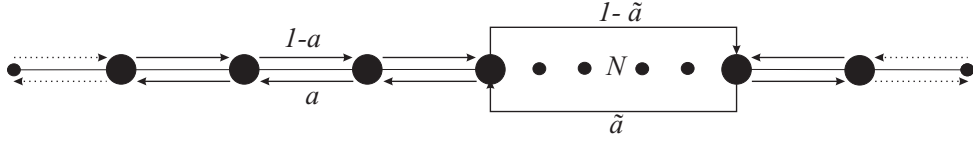


Figura 3.1: Diagrama del esquema de búsqueda

3.3. El modelo: relocalización y desplazamientos sesgados en la *búsqueda intermitente*

De manera similar a lo desarrollado en el Cap.2 (ver además [30, 61, 48]), suponemos que los caminantes se desplazan a través de una cadena infinita en cuyo origen esta ubicado el blanco fijo. Suponemos ahora que los buscadores poseen una ‘tendencia general’ de movimiento, es decir un sentido preferido para su desplazamiento (no necesariamente dirigido hacia la presa), que depende de su estado interno. Modelamos este comportamiento de búsqueda mediante una caminata asimétrica o con sesgo.

Supondremos que cada buscador posee dos comportamientos de búsqueda diferentes:

- *fase de búsqueda minuciosa*, durante la cual el buscador realiza una exploración compacta del área circundante. En esta fase encuentro con el blanco termina en captura.
- *fase de relocalización o exploración global*, durante la cual el buscador lleva a cabo la búsqueda en regiones distantes de la cadena. En esta fase la captura se lleva a cabo solo si el buscador tiene como destino final la posición del blanco.

Inicialmente, un conjunto de caminantes con distribución uniforme en la cadena, comienza la búsqueda del blanco. Este es atrapado con certeza (atrapamiento perfecto) cuando el primero de los buscadores arriba al sitio donde se encuentra.

Asociadas a las *fases* descritas, los buscadores pueden realizar dos tipos de movimiento en la cadena (Fig.3.1),

- *estado-1 (fase de búsqueda minuciosa)*: caminata aleatoria (random walk) con saltos a primeros vecinos y probabilidad de transición por unidad de tiempo $\lambda_1 = \lambda$;
- *estado-2 (fase de relocalización)*: random walk con saltos a N -ésimos vecinos y probabilidad de transición por unidad de tiempo $\lambda_2 = \lambda$.

Se consideran caminatas aleatorias separables con factores de estructura (en el espacio de Fourier): $p_1(k) = \cos(k) + i(1 - 2a) \sin(k)$ y $p_2(k) = \cos(Nk) + i(1 - 2\tilde{a}) \sin(Nk)$. Los coeficientes a , \tilde{a} determinan la asimetría o sesgo en el desplazamiento para cada estado.

En sistemas homogéneos, como la cadena considerada, la *probabilidad de supervivencia* (SP) $\Phi(t)$ [30, 56, 57, 58] puede ser escrita como $\Phi(t) = e^{-\rho S(t)}$, donde ρ corresponde a la probabilidad inicial de ocupación de cada sitio (o densidad de buscadores) y $S(t)$ al *número medio de sitios distintos visitados* hasta el tiempo t . Dada la definición de $\Phi(t)$ es obvio que maximizar $S(t)$ es equivalente a minimizar la SP. Fue demostrado en [58] que, para el caso en el cual la detección del blanco se produzca en cualquiera de los estados internos de los caminantes,

$$S_{Mar}(u) = \frac{1}{u^2 P_{Mar}(s=0, u|0, t=0)}. \quad (3.3)$$

$P_{Mar}(s, t|0, t=0)$ es la probabilidad marginal de encontrar al buscador en el sitio s al tiempo t , independiente de su estado interno,

$$P_{Mar}(s, t|0, t=0) = P_1(s, t|0, t=0) + P_2(s, t|0, t=0).$$

En el regimen de *alta tasa de transiciones entre estados internos* del caminante (Cap. 2 o [48]), con $(\gamma_1 + \gamma_2) \gg \lambda$ y $u \ll (\gamma_1 + \gamma_2)$ es posible expresar $P_{Mar}(s, u|0, t=0)$ en la forma,

$$P_{Mar}(s, u|0, t=0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{e^{iks} dk}{(1+u) - \left(\frac{\gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2}\right) p_1(k) - \left(1 - \frac{\gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2}\right) p_2(Nk)} \quad (3.4)$$

Llamando $\alpha = \frac{\gamma_1}{\gamma_1 + \gamma_2}$, $z = \frac{1}{u+1}$ (u y γ_i se miden en unidades de λ , es decir, $u \rightarrow u/\lambda$, $\gamma_i \rightarrow \gamma_i/\lambda$), $b = 1 - 2a$ y $\tilde{b} = 1 - 2\tilde{a}$ expresamos (3.4) como,

$$P_{Mar}(s, u|0, t=0) = \frac{z}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{e^{iks} dk}{1 - z[(1-\alpha)(\cos(k) + ib \sin(k)) + \alpha(\cos(Nk) + i\tilde{b} \sin(Nk))]} \quad (3.5)$$

Esta expresión corresponde a una generalización de la ecuación (2.30) del Cap. 2 (ec. (15) en [48]).

3.3.1. Longitud del desplazamiento y su efecto en el proceso de búsqueda

En esta sección consideramos diferentes longitudes de desplazamiento para la *fase de relocalización* y estudiamos el efecto que estas generan en la optimización del proceso de búsqueda. Suponemos, en este apartado, que no existe asimetría en el desplazamiento de los buscadores ($b = \tilde{b} = 0$); podemos entonces deducir que:

$$P_{Mar}(s, u|0, t=0) = \frac{z}{\pi} \int_0^{\pi} \frac{\cos(ks) dk}{1 - z[(1-\alpha) \cos(k) + \alpha \cos(Nk)]} \quad (3.6)$$

Llamando k_i a las raíces de

$$1 - z[(1 - \alpha) \cos(k) + \alpha \cos(Nk)] = 0$$

y utilizando la identidad,

$$2 \cos(Nk) = (2 \cos(k))^N - N(2 \cos(k))^{N-2} + \frac{N}{2} \binom{N-3}{1} (2 \cos(k))^{N-4} - \dots,$$

podemos escribir la ecuación (3.6) en la forma,

$$P_{Mar}(s, u|0, t = 0) = \frac{1}{2^{N-1}\alpha} \sum_{i=1}^N A_i \int_0^\pi \frac{\cos(ks)}{(\cos(k) - \cos(k_i))} dk, \quad (3.7)$$

donde los coeficientes A_i se expresan en función de las raíces k_i .

La evaluación de la integral en la Ec. 3.7 puede realizarse en forma analítica (si bien requiere una gran cantidad de manipulaciones algebraicas), hasta $N = 4$. Los resultados mencionados se presentan en la sección 3.4, realizando en forma numérica la inversión en Laplace. En la misma sección se muestran además resultados para $N > 4$ los cuales fueron obtenidos a través de simulaciones de Monte Carlo.

3.3.2. Caminatas aleatorias “sesgadas”

Consideramos ahora “un cierto grado de anisotropía” en el desplazamiento de los caminantes. Con el fin de simplificar el tratamiento analítico, consideramos de ahora en más saltos a 2^{dos} vecinos para la fase de relocalización.

Sesgo ‘débil’ y con la misma orientación en ambos estados

Suponiendo la misma anisotropía en ambos estados ($b = \tilde{b}$) y valores de $b \ll 1$ ($a \simeq \frac{1}{2}$), que implica un régimen de sesgo ‘débil’, es posible realizar un análisis perturbativo de la Ec. (3.5) en términos del sesgo b en la forma,

$$P_{Mar}(s, u|0, t = 0) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos(ks) P_{Mar}(k, u|0, t = 0) \Big|_{b=0} dk \quad (3.8)$$

$$+ \frac{b^2}{\pi} \int_0^\pi \cos(ks) \frac{\partial^2 P_{Mar}(k, u|0, t = 0)}{\partial b^2} \Big|_{b=0} dk + \dots$$

Una vez valuado en $b = 0$ el integrando se transforma en una función simétrica por lo que los términos impares de la expansión en potencias de b se anulan.

Sesgo arbitrario en cada estado

Para tratar el caso general, con valores arbitrarios de b y \tilde{b} , partimos de la ecuación (3.5) y adoptamos la notación $P_{Mar}(s, u|0, t = 0) \equiv P_{Mar}(s, u)$:

$$P_{Mar}(s, u) = \frac{z}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{e^{iks} dk}{1 - z[\alpha(\cos(k) + ib \sin(k)) + (1 - \alpha)(\cos(2k) + i\tilde{b} \sin(2k))]} \quad (3.9)$$

Definiendo $\nu = \exp(ik)$ y utilizando las relaciones $\cos(Nk) = \frac{\exp(iNk) + \exp(-iNk)}{2}$, $\sin(Nk) = \frac{\exp(iNk) - \exp(-iNk)}{2i}$, llevamos la ec. (3.9) a una integral a lo largo del círculo unitario en el plano complejo:

$$P_{Mar}(s, u) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|\nu|=1} \frac{\nu^{s+1} d\nu}{\frac{-\alpha(1+\tilde{b})}{2} [\nu^4 + \frac{(1-\alpha)(1+b)}{\alpha(1+\tilde{b})} \nu^3 - \frac{2}{z\alpha(1+b)} \nu^2 + \frac{(1-\alpha)(1-b)}{\alpha(1+\tilde{b})} \nu + \frac{(1-b)}{(1+\tilde{b})}]} \quad (3.10)$$

Las raíces en el denominador de (3.10) pueden encontrarse a partir de procedimientos convencionales [59]. Llamando ν_l a la raíz l -ésima escribimos la última integral en la forma:

$$\begin{aligned} P_{Mar}(s, u) &= -\frac{2}{\alpha(1+\tilde{b})} \frac{1}{2\pi i} \oint_{|\nu|=1} \prod_l \frac{\nu^{s+1}}{\nu - \nu_l} d\nu \\ &= -\frac{2}{\alpha(1+\tilde{b})} \sum_l \frac{A_l}{2\pi i} \oint_{|\nu|=1} \frac{\nu^{s+1}}{\nu - \nu_l} d\nu, \end{aligned} \quad (3.11)$$

donde la última igualdad resulta de expandir la productoria en fracciones parciales. A partir de dicha expansión obtenemos los coeficientes A_l , los que se expresan en términos de las raíces ν_i ; por ejemplo: $A_1 = [(\nu_1 - \nu_2)(\nu_1 - \nu_3)(\nu_1 - \nu_4)]^{-1}$, $A_2 = [(\nu_2 - \nu_1)(\nu_2 - \nu_3)(\nu_2 - \nu_4)]^{-1}$. Para evaluar la integral en la ec.(3.11) (utilizando el Teorema de los Residuos de Cauchy) consideramos sólo aquellas raíces que estén en el interior del círculo unidad.

3.4. Ilustraciones

En este apartado ilustramos los resultados de secciones anteriores. Las expresiones analíticas fueron obtenidas en el espacio de Laplace y sus antitransformadas evaluadas numéricamente [60]. Para presentar los resultados en forma clara fijamos algunos parámetros, particularmente tomamos como condiciones iniciales $g_1 = g_2 = 1/2$ y un tiempo máximo de evolución $t = 100$. Con el fin de evaluar la exactitud de los resultados teóricos realizamos simulaciones tipo Monte Carlo. En relación a las simulaciones mencionamos que el proceso generado es tal que a cada click del reloj el caminante elige saltar hacia primeros vecinos o hacia N -ésimos vecinos con una probabilidad α o $1 - \alpha$ respectivamente.

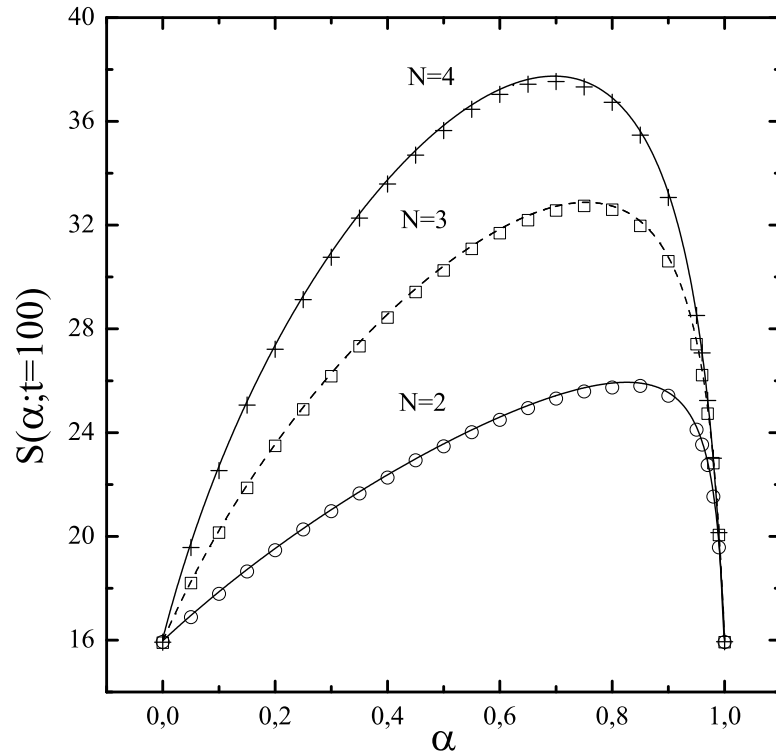


Figura 3.2: Resultados analíticos-numéricos (líneas) y simulaciones Monte Carlo (símbolos) para $S(t)$ -número medio de sitios distintos visitados-hasta $t = 100$, como una función de α . Representamos en la figura diferentes longitudes de salto en el estado 2 (relocalización): círculos -segundos vecinos-, cuadrados -terceros vecinos- y cruces -cuartos vecinos-.

Diferentes longitudes de salto en el estado de relocalización

En la Figura 3.2 mostramos el *número medio de sitios distintos visitados*, $S(t)$, como una función de α para diferentes longitudes de salto (N) en el estado de relocalización. A partir de las curvas presentadas se observa que el *máximo* de $S(t)$ varía con la longitud del salto. Este comportamiento es descrito en forma más clara en la Fig.3.3, donde representamos el *máximo* de $S(t)$ como función de la longitud de salto en el estado de relocalización. Esta figura muestra una curva creciente hacia un valor estacionario, el cual puede ser entendido teniendo en cuenta que, cuando la longitud de salto (en el estado 2) aumenta, la posibilidad de ‘revisitar’ sitios ya visitados por el estado 1 es baja. Este análisis también se sustenta en el inset ubicado en la misma figura, en el cual presentamos α_{Max} , probabilidad de transición que maximiza $S(t)$, como función de N . En el inset observamos una curva decreciente hacia un valor estacionario ($\alpha \simeq 0,5$); cuando la longitud de salto es pequeña una búsqueda ‘óptima’ requiere realizar una mayor cantidad de excursiones en la *fase de relocalización* ($\alpha > 0,5$) a fin de evitar ‘revisitar’ sitios ya explorados por el estado 1. Para valores mayores de N , las ‘coincidencias’ en los sitios visitados disminuye y una elección equiprobable de las fases ($\alpha \simeq 0,5$) se convierte en la elección ‘óptima’.

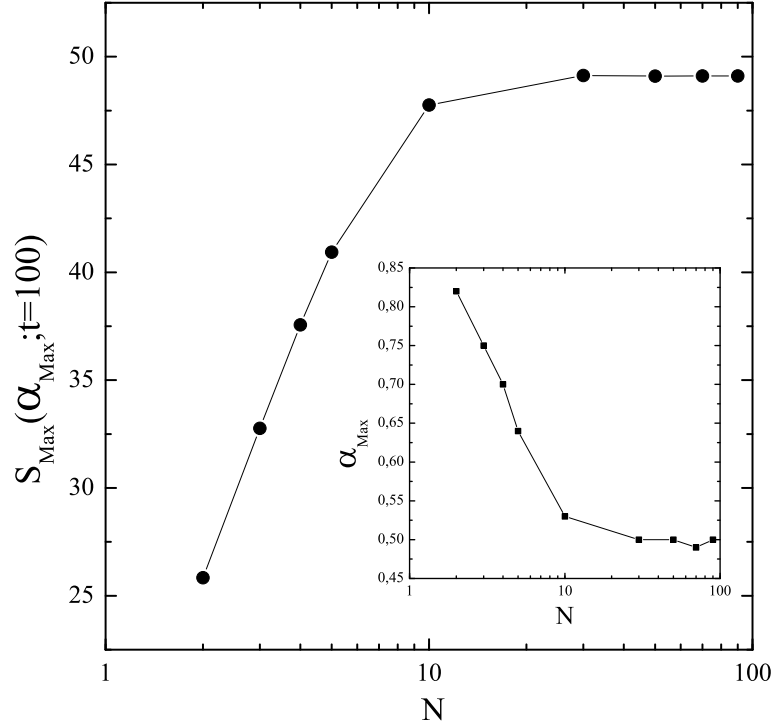


Figura 3.3: $S(t)_{\text{Max}}$ -número medio de sitios distintos visitados en α_{Max} (probabilidad de transición que maximiza $S(t)$)- como función de la longitud de salto (en el estado 2) N . Inset: α_{Max} también como función de la longitud de salto N . Los resultados presentados corresponden a simulaciones de Monte Carlo.

Desplazamiento “sesgado” en el proceso de búsqueda

En la Figura 3.4 analizamos el caso en que existe un pequeño sesgo en ambos estados ($b = \tilde{b}$ o $a = \tilde{a}$). En la misma presentamos resultados analíticos-numéricos y simulaciones tipo Monte Carlo, los cuales muestran que ‘pequeñas’ desviaciones (respecto de la situación sin sesgo) producen una respuesta similar y de acuerdo a las predicciones de la teoría.

En la figura 5-a presentamos el diagrama de fases que resume el comportamiento del sistema respecto al sesgo para un tiempo $t = 100$. El diagrama se gráfica en función de α (el parámetro que regula la intermitencia) y la diferencia de sesgo, $a - \tilde{a}$ ($-(a - \tilde{a})$ genera el mismo diagrama). En escala de grises mostramos el *número medio de sitios distintos visitados*; un degrade de colores hacia el negro identifica valores cada vez mayores de $S(\alpha, a - \tilde{a}; t = 100)$.

En las figuras 5-b y 5-c estudiamos en detalle el efecto del sesgo. En las mismas mostramos cortes correspondientes al diagrama de fases $S(\alpha, a - \tilde{a}; t = 100)$; cada corte (línea de puntos) I-VI mostrado en la figura 5-a corresponde a una curva en las figuras 5-b o 5-c. Estas figuras, que contienen información muy rica para el análisis, corresponden

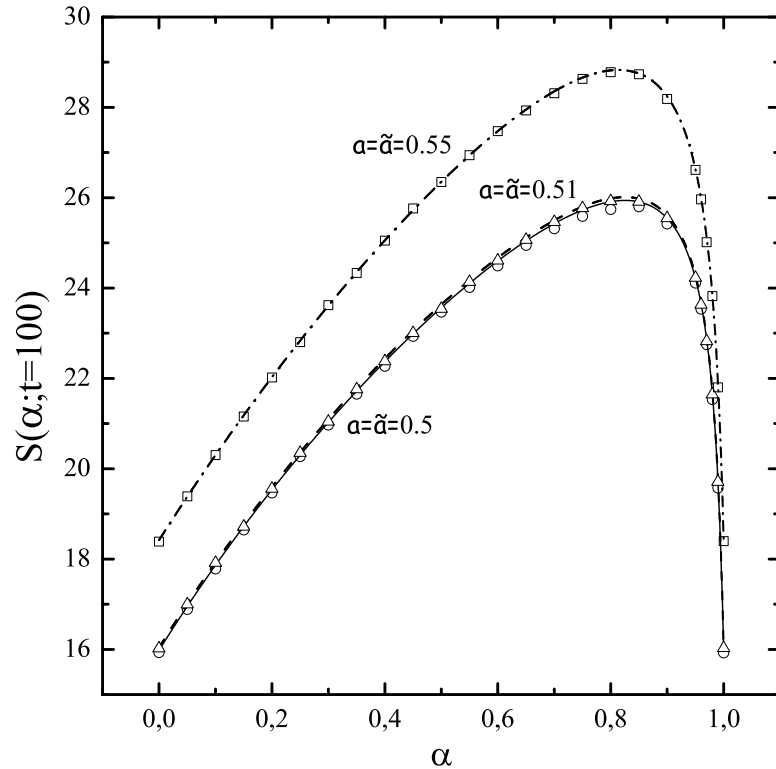


Figura 3.4: $S(t)$ como una función de α para el caso que existe un pequeño sesgo en ambos estados ($a = \tilde{a}$). Símbolos corresponden a simulaciones tipo Monte Carlo para $a = 0,5$ -círculos- (sin sesgo), $a = 0,51$ -triángulos- y $a = 0,55$ -cuadrados- respectivamente y las curvas continuas corresponden a resultados analíticos-numéricos.

al caso en el cual existe un fuerte sesgo en el estado 1, situación que comparamos con diferentes formas de movimiento en el estado 2. Cuando el sesgo en la fase de relocalización es opuesto al del estado 1, las curvas presentan un máximo y un mínimo local (curvas I y II en la Fig. 5-b). Este resultado es novedoso, puesto que las respuestas obtenidas hasta el momento en este tipo de sistemas mostraban un comportamiento no monótono pero sólo con un máximo. Disminuyendo el sesgo en el estado 2 (por ejemplo: $\tilde{a} = 0,45$) el máximo desaparece y un ‘plateau’ de valores constantes de $S(t)$ aparece (curva III). Si incrementamos el sesgo de la fase de relocalización -en la misma dirección que la del estado 1- las curvas decrecen en forma monótona (curvas IV y V en 5-c). Esta comportamiento se mantiene hasta que el sesgo en ambos estados es el mismo (o su diferencia es mínima), situación en la cual recuperamos el máximo en $S(t)$ (curva VI). Resaltamos el buen acuerdo entre los resultados analíticos-numéricos y las simulaciones de Monte Carlo.

El mínimo obtenido en la figura 5-b puede ser explicado teniendo en cuenta que:

- el buscador tiene una tendencia general (sesgo) que es opuesto en ambos estados, es decir, la tendencia del desplazamiento en un estado es ‘contraria’ a la del estado restante.

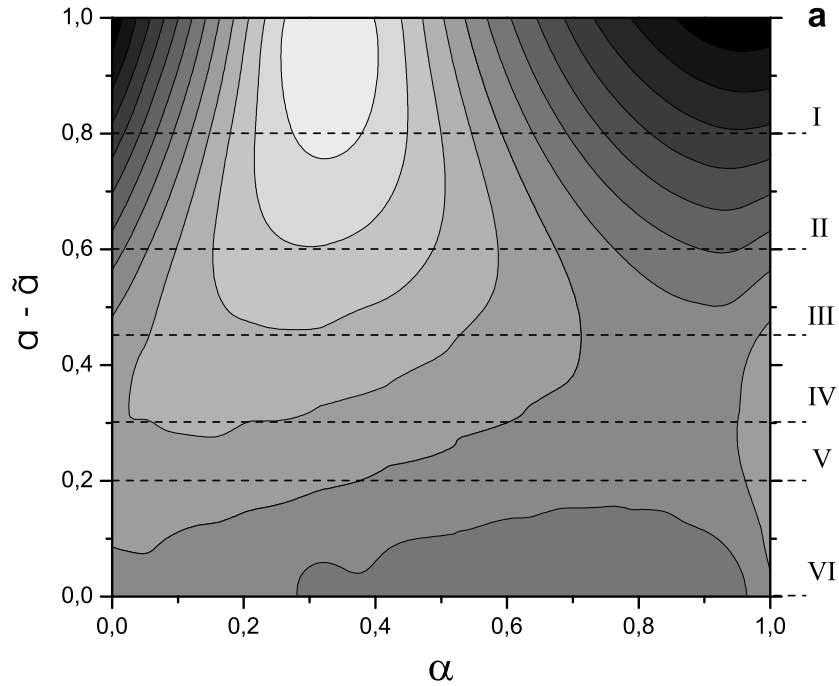


Figura 3.5: **a**-Diagrama de Fases del sistema cuando existe sesgo en ambos estados para un tiempo $t = 100$ como una función de α (parámetro que regula la intermitencia) y la diferencia de sesgos ($a - \tilde{a}$). En la figura un color más oscuro identifica un valor más alto de $S(\alpha, a - \tilde{a}; t = 100)$

- los casos $\alpha \sim 0$, $\alpha \sim 1$ (estados de movimiento monoestado), son directos en su análisis. Estos corresponden a buscadores que pasan la mayor parte de su tiempo en el estado 1 o 2 respectivamente y puesto que los dos son sesgados tenemos que ([56]), $S_{\alpha \sim 0}(t) \sim |1 - 2a| t$ y $S_{\alpha \sim 1}(t) \sim |1 - 2\tilde{a}| t$ tal cual muestra la Fig.5-b.
- para la situación de mínimo ($\alpha < 0,5$) el caminante permanece la mayor parte del tiempo (pero no todo) en la *fase de búsqueda*. En este estado (saltos a primeros vecinos) se realiza una exploración ‘compacta’; cada sitio es visitado por lo que una transición al estado 2 es probable que finalice en un sitio ya visitado (por el estado 1) contribuyendo de esta forma, a un *mínimo* en el *número medio de sitios distintos visitados*

Notamos que la situación de mínimo no se alcanza para valores de $\alpha > 0,5$. Podemos comprender este comportamiento considerando la forma en la cual el buscador recorre el espacio. Para valores de $\alpha > 0,5$, el buscador permanece gran parte de su tiempo en la *fase de relocalización* (saltos a 2^{dos} vecinos). En esta situación el ‘patrón’ de los sitios visitados puede ser pensado como un ‘colador’ (lo que podríamos interpretar como una manera defectuosa de cubrir el territorio); sin embargo, las transiciones al estado 1 (saltos a primeros vecinos) son propensas a llenar los espacios dejados por el caminante en su recorrido en el estado 2. De esta manera, las transiciones en el régimen $\alpha > 0,5$ contribuyen

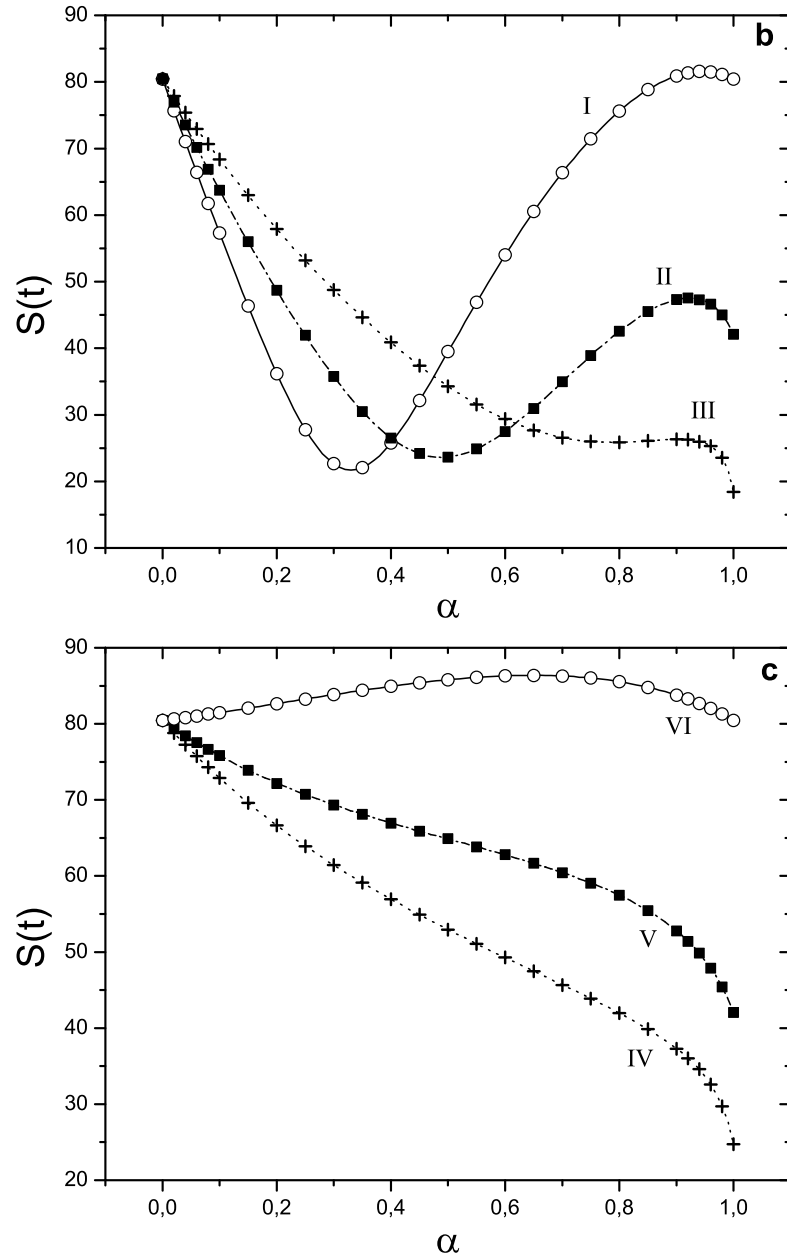


Figura 3.5: Resultados analíticos-numéricos (líneas) y simulaciones de Monte Carlo (símbolos) para el *número medio de sitios distintos visitados* hasta $t = 100$, para un movimiento cuasi-balístico en el estado 1 ($a = 0,9$). **(b)** Movimiento sesgado hacia la derecha en el estado 2, círculos $\tilde{a} = 0,1$ (I), cuadrados $\tilde{a} = 0,3$ (II), cruces $\tilde{a} = 0,45$ (III). **(c)** Movimiento sesgado hacia la izquierda, cruces $\tilde{a} = 0,6$ (IV), cuadrados $\tilde{a} = 0,7$ (V), círculos $\tilde{a} = 0,9$ (VI).

de manera positiva incrementando el número medio de sitios distintos visitados.

3.5. Conclusiones del capítulo

En este capítulo presentamos un modelo analíticamente resoluble de la *búsqueda intermitente* un blanco que permanece fijo en el origen de una cadena. El modelo está basado en el esquema CTRW y los resultados presentados extienden los obtenidos en el Cap. 2 (y lo publicado en [30, 61, 48]).

Consideramos, tanto la influencia del sesgo (anisotropía) en el desplazamiento de ambos estados, como la de la longitud del desplazamiento en la *fase de relocalización*. Caracterizamos la intermitencia entre los estados o *fases* de búsqueda, mediante funciones densidad del tipo exponencial de parámetros γ_1 y γ_2 (dinámica de primer orden), aunque el enfoque teórico propuesto es general.

La presente generalización del trabajo efectuado en el Cap. 2 (y de [48]) nos permitió obtener una fenomenología muy rica para el análisis; pasando de un mínimo absoluto y a través de un comportamiento monótono, hacia situaciones con un mínimo y un máximo local y finalmente hacia un máximo absoluto. Se logro además un muy buen acuerdo entre la teoría evaluada numéricamente y las simulaciones de Monte Carlo realizadas.

Creemos haber dado un paso más en la construcción de un modelo realista para el esquema de búsqueda *intermitente* al incorporar el efecto del sesgo y diferentes longitudes para la fase de relocalización.

Capítulo 4

Búsqueda intermitente de un blanco: 'pistas en el camino'

4.1. Introducción

En el Capítulo 2 presentamos un modelo para la cinética de búsqueda *intermitente* de un blanco donde consideramos que la orientación para el desplazamiento de los buscadores, era elegida al azar (es decir, sin tener en cuenta las posibles señales del blanco). Sin embargo, los buscadores generalmente intentan hallar el blanco a través de las señales químicas emitidas por este, estímulos visuales, etc. En la referencia [62], por ejemplo, se consideró la 'agudeza' visual como capacidad adicional en la búsqueda. Aquella genera en los buscadores un movimiento determinista una vez que el blanco entra en su rango visual. La percepción de indicios químicos por parte del buscador actúa para sesgar u orientar su locomoción y dirigirlo hacia el blanco [22]. A pesar de la importancia de las estrategias de búsqueda guiadas mediante señales químicas, su funcionamiento detallado no ha sido rigurosamente estudiado hasta el presente [23], siendo en la actualidad un campo de investigación interdisciplinario que se encuentra en rápido crecimiento [40, 24].

En el presente capítulo extendemos el modelo original (Caps. 2 y 3) incorporando un aspecto relevante para un proceso realista de búsqueda: la consideración de 'señales' (rastros, 'olores', etc.) que puede dejar un blanco en su entorno. Modelamos estas 'señales' mediante *inhomogeneidades* en las cercanías del blanco y las estudiamos a partir de las *caminatas aleatorias multiestado* [56] y de la *técnica de la inhomogeneidad local* desarrollada en [57, 63, 64].

Con el objeto de resaltar la implicancia de estas señales en la búsqueda y localización del blanco, estudiamos el caso de un **único** caminante/buscador ubicado inicialmente en algún sitio arbitrario de nuestro sistema en cuyo origen se encuentra el mencionado blanco. En el Capítulo 5 realizamos un análisis exhaustivo (desarrollando un formalismo novedoso en esta área) de la influencia que poseen diferentes distribuciones iniciales de buscadores en el proceso de búsqueda de un único blanco (*target problem*). Utilizamos el

concepto de la *probabilidad de supervivencia* (SP) del blanco en presencia del buscador y establecemos la conexión entre la SP y el *tiempo del primer pasaje* (FPT) correspondiente al caminante.

El resumen del Capítulo es el siguiente: en la próxima sección (4.2) presentamos las definiciones y conceptos básicos a utilizar. En la misma sección definimos el modelo, consideramos el esquema de *alta tasa de transiciones del buscador* y la solución analítica obtenida para diferentes casos de interés. En la sección 4.3 presentamos las ilustraciones correspondientes a los principales resultados analíticos (y su evaluación numérica) obtenidos para la SP y los comparamos con simulaciones tipo Monte Carlo. Finalmente, en la sección 4.4 discutimos las conclusiones del presente capítulo.

4.2. Enfoque Analítico

4.2.1. El proceso compuesto

Suponemos que al tiempo t el caminante (buscador) puede estar en el sitio \vec{s} de una red, en uno de dos estados internos. Asociamos el *estado interno 1* a una fase de relocalización (exploración de regiones distantes) y al *estado interno 2* a una fase de búsqueda minuciosa (exploración compacta).

Las probabilidades condicionales (que describen el proceso de transporte intermitente) $P_{i,i_0}(\vec{s}, t | \vec{s}_0, t = 0)$ de que el caminante este en \vec{s} en el estado interno i al tiempo t , dado que partió en $t = 0$ de \vec{s}_0 con estado interno i_0 , satisfacen el siguiente conjunto de ecuaciones maestras acopladas:

$$\frac{\partial P_{1,i_0}(\vec{s}, t | \vec{s}_0, 0)}{\partial t} = \mathbb{A}_1 P_{1,i_0}(\vec{s}, t | \vec{s}_0, 0) + \gamma_2 P_{2,i_0}(\vec{s}, t | \vec{s}_0, 0) - \gamma_1 P_{1,i_0}(\vec{s}, t | \vec{s}_0, 0) \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial P_{2,i_0}(\vec{s}, t | \vec{s}_0, 0)}{\partial t} = \mathbb{A}_2 P_{2,i_0}(\vec{s}, t | \vec{s}_0, 0) + \gamma_1 P_{1,i_0}(\vec{s}, t | \vec{s}_0, 0) - \gamma_2 P_{2,i_0}(\vec{s}, t | \vec{s}_0, 0), \quad (4.2)$$

donde denotamos con γ_i a las tasas de transición entre estados internos (suponemos una dinámica de “primer orden” para estas transiciones) y por \mathbb{A}_i los operadores que describen la propagación del caminante en cada estado. Resaltamos que:

- mientras el caminante cambia su estado interno no existe desplazamiento espacial;
- las probabilidades condicionales $P_{i,i_0}(\vec{s}, t | \vec{s}_0, t = 0)$ no están normalizadas para cada valor de i , es decir, $\sum_{\vec{s}} P_{i,i_0}(\vec{s}, t | \vec{s}_0, t = 0) \neq 1$. Esto se debe al hecho de que cada $P_{i,i_0}(\vec{s}, t | \vec{s}_0, t = 0)$ tiene una ‘pérdida’ (controlada por la tasa de transición γ_i) hacia el otro estado interno;
- la probabilidad marginal, $P_{Mar,i_0}(\vec{s}, u | \vec{s}_0, t = 0) = P_{1,i_0}(\vec{s}, u | \vec{s}_0, t = 0) + P_{2,i_0}(\vec{s}, u | \vec{s}_0, t = 0)$, esta adecuadamente normalizada: $\sum_{\vec{s}} P_{Mar,i_0}(\vec{s}, u | \vec{s}_0, t = 0) = 1$;

- por simplicidad hemos considerado solo dos estados internos aunque este modelo puede ser extendido a un número arbitrario de estados.

4.2.2. El proceso de atrapamiento

Analizaremos el proceso de atrapamiento mediante la *probabilidad de supervivencia* del blanco considerando que la búsqueda finaliza cuando el caminante encuentra el blanco por primera vez (atrapamiento “perfecto”). Para este tipo de atrapamiento existe una magnitud estrechamente relacionada con la SP: la densidad del tiempo del primer pasaje del caminante (*first-passage time density* - FPTD).

Definimos $F_{1,i_0}^I(\vec{0}, t|\vec{s}_0, 0)$ ($F_{2,i_0}^I(\vec{0}, t|\vec{s}_0, 0)$) como la FPTD de un caminante por el sitio $\vec{0}$ al tiempo t dado que estuvo en el sitio \vec{s}_0 con estado interno i_0 al tiempo $t = 0$ cuando la captura es posible sólo en el estado interno 1 (2). En lo que sigue utilizamos la noción de *estados generalizados* (introducidos en [26]) los cuales tienen en cuenta la posición y el estado interno del buscador, (\vec{s}, i) .

La conexión entre la *densidad de probabilidad del primer pasaje* por $(\vec{0}, 1)$ al tiempo t desde (\vec{s}_0, i_0) , $F_{1,i_0}^I(\vec{0}, t|\vec{s}_0, 0)$, y la probabilidad condicional $P_{i,i_0}(\vec{s}, t|\vec{s}_0, t = 0)$ viene dada por,

$$\hat{F}_{1,i_0}^I(\vec{0}, u|\vec{s}_0, 0) = \frac{\hat{P}_{1,i_0}(\vec{0}, u|\vec{s}_0, 0)}{\hat{P}_{1,1}(\vec{0}, u|\vec{0}, 0)}. \quad (4.3)$$

Si el “estado de captura” es $(\vec{0}, 2)$ existe una expresión similar,

$$\hat{F}_{2,i_0}^I(\vec{0}, u|\vec{s}_0, 0) = \frac{\hat{P}_{2,i_0}(\vec{0}, u|\vec{s}_0, 0)}{\hat{P}_{2,2}(\vec{0}, u|\vec{0}, 0)}. \quad (4.4)$$

De esta forma re-obtenemos la formula de Siegert [65], generalizada a estados internos [66].

Cuando la captura se produce en *cualquier* estado interno i (1 o 2) del caminante, definimos a $F_{i,i_0}^{II}(\vec{0}, t|\vec{s}_0, 0)$ ($F_{2,i_0}^{II}(\vec{0}, t|\vec{s}_0, 0)$) como la *densidad del tiempo del primer pasaje* por el estado generalizado $(\vec{0}, i)$ al tiempo t dado que partió de (\vec{s}_0, i_0) al tiempo $t = 0$. Es posible establecer una relación entre F^I y F^{II} notando que:

$$F_{1,i_0}^{II}(\vec{0}, t|\vec{s}_0, 0) = F_{1,i_0}^I(\vec{0}, t|\vec{s}_0, 0) - \int_0^t F_{1,2}^I(\vec{0}, t|\vec{0}, \tau) F_{2,i_0}^{II}(\vec{0}, \tau|\vec{s}_0, 0) d\tau \quad (4.5)$$

$$F_{2,i_0}^{II}(\vec{0}, t|\vec{s}_0, 0) = F_{2,i_0}^I(\vec{0}, t|\vec{s}_0, 0) - \int_0^t F_{2,1}^I(\vec{0}, t|\vec{0}, \tau) F_{1,i_0}^{II}(\vec{0}, \tau|\vec{s}_0, 0) d\tau. \quad (4.6)$$

Las ecuaciones (4.5) y (4.6) pueden interpretarse de la siguiente manera: el primer miembro en ambas ecuaciones representa la FPTD cuando la captura se produce en *alguno* de los dos estados internos, mientras que, en el segundo miembro el primer término tiene en cuenta los eventos de atrapamiento cuando *sólo* uno de los estados captura y el segundo

descuenta las contribuciones de los ‘caminos’ que pasan por el estado de atrapamiento $(\vec{0}, 1)$ en la ec. (4.5) o $(\vec{0}, 2)$ en la ec. (4.6).

En el espacio de Laplace este par de ecuaciones adopta la forma:

$$\hat{F}_{1,i_0}^{II}(\vec{0}, u|\vec{s}_0, 0) + \hat{F}_{2,i_0}^{II}(\vec{0}, u|\vec{s}_0, 0)\hat{F}_{1,2}^I(\vec{0}, u|\vec{0}, 0) = \hat{F}_{1,i_0}^I(\vec{0}, u|\vec{s}_0, 0) \quad (4.7)$$

$$\hat{F}_{2,i_0}^{II}(\vec{0}, u|\vec{s}_0, 0) + \hat{F}_{1,i_0}^{II}(\vec{0}, u|\vec{s}_0, 0)\hat{F}_{2,1}^I(\vec{0}, u|\vec{0}, 0) = \hat{F}_{2,i_0}^I(\vec{0}, u|\vec{s}_0, 0). \quad (4.8)$$

Una expresión similar (aunque en un contexto diferente) fue obtenida en la referencia [67].

Si el atrapamiento se produce en *cualquiera* de los dos estados, la SP (la probabilidad de que el blanco no sea encontrado antes de un tiempo t) es (si $\vec{s}_0 \neq \vec{0}$):

$$\Phi_{i_0}^{II}(\vec{0}, t|\vec{s}_0, 0) = 1 - \int_0^t [F_{1,i_0}^{II}(\vec{0}, \tau|\vec{s}_0, 0) + F_{2,i_0}^{II}(\vec{0}, \tau|\vec{s}_0, 0)] d\tau \quad (4.9)$$

Sumando las ecuaciones (4.7) y (4.8) y utilizando los resultados de las ecuaciones (7.2) y (4.4) encontramos que:

$$\hat{F}_{1,i_0}^{II}(\vec{0}, u|\vec{s}_0, 0)\hat{P}_{Mar,1}(\vec{0}, u|\vec{0}, 0) + \hat{F}_{2,i_0}^{II}(\vec{0}, u|\vec{s}_0, 0)\hat{P}_{Mar,2}(\vec{0}, u|\vec{0}, 0) = \hat{P}_{Mar,i_0}(\vec{0}, u|\vec{s}_0, 0), \quad (4.10)$$

donde $P_{Mar,i_0}(\vec{s}, t|\vec{s}_0, 0)$ es la probabilidad de distribución *marginal*,

$$P_{Mar,i_0}(\vec{s}, t|\vec{s}_0, 0) = P_{1,i_0}(\vec{s}, t|\vec{s}_0, 0) + P_{2,i_0}(\vec{s}, t|\vec{s}_0, 0). \quad (4.11)$$

4.2.3. Altas tasas de transición entre estados del caminante

Siguiendo los lineamientos de la referencia [68] y utilizando las ecuaciones (6.1) y (6.2) se puede demostrar que, en el regimen de *alta tasa de transiciones y tiempos largos* (Cap. 2), la distribución de probabilidad de los estados internos del caminante se vuelve estacionaria y la distribución espacial es gobernada por la ecuación de transporte ‘promediada’:

$$\frac{\partial P_{Mar}(\vec{s}, t|\vec{s}_0, 0)}{\partial t} = \tilde{\mathbb{A}}P_{Mar}(\vec{s}, t|\vec{s}_0, 0), \quad (4.12)$$

donde $\tilde{\mathbb{A}} = \alpha\mathbb{A}_1 + (1 - \alpha)\mathbb{A}_2$,

$$\alpha = \frac{\gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} \quad (4.13)$$

y $P_{Mar}(\vec{s}, t|\vec{s}_0, 0)$ es la distribución de probabilidad *marginal*, es decir:

$$P_{Mar}(\vec{s}, t|\vec{s}_0, 0) = P_{1,i_0}(\vec{s}, t|\vec{s}_0, 0) + P_{2,i_0}(\vec{s}, t|\vec{s}_0, 0). \quad (4.14)$$

A partir de estas ecuaciones observamos que $\alpha = 0$ ($\alpha = 1$) implica que el caminante no puede saltar hacia el estado 1 (2). Resaltamos que, en el límite considerado, la condición inicial sobre el estado interno desaparece. Esto implica que la evaluación de cualquier

propiedad estadística resulta independiente del estado interno inicial del caminante. Teniendo en cuenta este hecho y la ecuación (4.10) puede mostrarse que:

$$\hat{F}_{1,i_0}^{II}(\vec{0}, u|\vec{s}_0, 0) + \hat{F}_{2,i_0}^{II}(\vec{0}, u|\vec{s}_0, 0) = \frac{\hat{P}_{Mar}(\vec{0}, u|\vec{s}_0, 0)}{\hat{P}_{Mar}(\vec{0}, u|\vec{0}, 0)}, \quad (4.15)$$

La *probabilidad de supervivencia* (ec. (6.5)) toma entonces la forma:

$$\begin{aligned} \hat{\Phi}^{II}(\vec{0}, u|\vec{s}_0, 0) &= \frac{1}{u} \left(1 - [\hat{F}_{1,i_0}^{II}(\vec{0}, u|\vec{s}_0, 0) + \hat{F}_{2,i_0}^{II}(\vec{0}, u|\vec{s}_0, 0)] \right) \\ &= \frac{1}{u} \left(1 - \frac{\hat{P}_{Mar}(\vec{0}, u|\vec{s}_0, 0)}{\hat{P}_{Mar}(\vec{0}, u|\vec{0}, 0)} \right) \end{aligned} \quad (4.16)$$

4.2.4. El modelo: “pistas en el camino”

Suponemos, en forma similar al Cap. 2 ([48]), que los buscadores se desplazan a través de una cadena infinita en cuyo origen esta ubicado un blanco fijo. Dado que el cálculo lleva a cabo en una cadena (red 1D), abandonamos la notación vectorial. En $t = 0$, un caminante que parte de s_0 comienza la “búsqueda” y, cuando encuentra el blanco, lo captura con certeza (atrapamiento perfecto). Supondremos que el buscador posee dos comportamientos de búsqueda diferentes:

- *fase de relocalización (estado interno 1)*, durante la cual el buscador lleva a cabo la búsqueda en regiones distantes de la cadena. En esta fase la captura se lleva a cabo sólo si el buscador tiene como destino posible la posición del blanco.
- *fase de exploración compacta (estado interno 2)*, durante la cual el buscador realiza una búsqueda minuciosa del área circundante. En esta fase un encuentro con el blanco termina en captura.

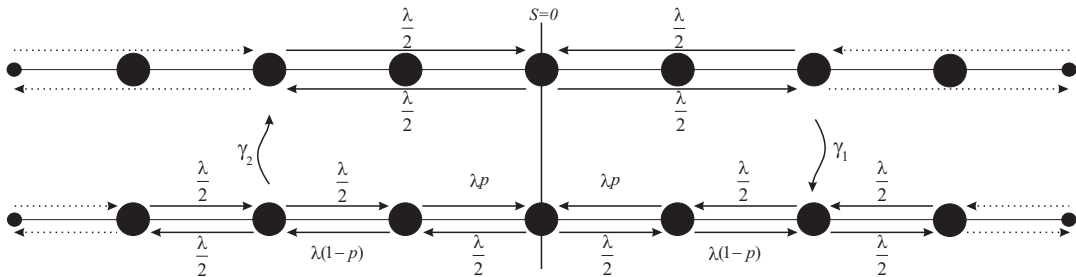


Figura 4.1: Esquema de transiciones entre sitios de la cadena y estados internos del buscador: el estado 1 corresponde a la fase de relocalización y el estado 2 corresponde a la fase de exploración compacta

En las cercanías del origen (posición del blanco) existen señales (‘rastros’ u ‘olores’) que incrementan o evaden la detección, dependiendo de que el ‘rastro’ esté por debajo o por

4.2. ENFOQUE ANALÍTICO

encima de un valor crítico p ($p = 0,5$ corresponde al caso indiferente - sin rastro). Si bien es posible que el blanco sea detectado en cualquiera de los dos estados o fases del buscador, las *señales* son sólo perceptibles en el estado de exploración compacta. Esta consideración refuerza el hecho de que desplazarse a regiones lejanas (*fase de relocalización*) es a expensas de un muestreo poco preciso (coarse-grained sampling), esto implica que la capacidad de detección del buscador en esta fase es ‘pobre’. Por el contrario, en el estado de *exploración compacta* el buscador se beneficia al detectar el ‘rastro’ en forma precisa, lo que le permite orientar el movimiento hacia el origen del rastro donde está ubicado el blanco [25].

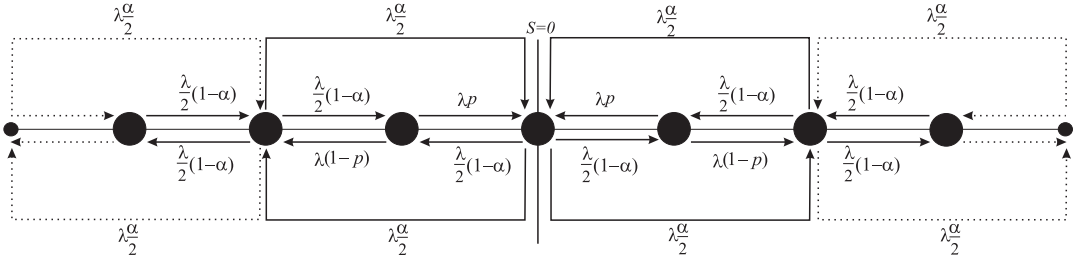


Figura 4.2: Esquema de transiciones para la distribución de probabilidad marginal en el régimen de alta tasa de transiciones.

En cada estado interno, el desplazamiento del buscador sobre la red es descrito (para el caso de dos inhomogeneidades simétricas, $N = 2$) por los siguientes operadores \mathbb{A}_i :

$$[\mathbb{A}_2]_{s,s'} = \frac{\lambda}{2} [\delta_{s,s'-1} + \delta_{s,s'+1} - 2\delta_{s,s'}] \quad \forall \quad s' \neq -1, 1, \quad (4.17)$$

$$[\mathbb{A}_2]_{1,0} = [\mathbb{A}_1]_{-1,0} = [\mathbb{A}_1]_{1,2} = [\mathbb{A}_2]_{-1,-2} = \frac{\lambda}{2} \quad (4.18)$$

$$[\mathbb{A}_2]_{1,1} = [\mathbb{A}_2]_{-1,-1} = [\mathbb{A}_2]_{0,0} = -\lambda \quad (4.19)$$

$$[\mathbb{A}_2]_{2,1} = [\mathbb{A}_2]_{-2,-1} = (1-p)\lambda \quad (4.20)$$

$$[\mathbb{A}_2]_{0,1} = [\mathbb{A}_2]_{0,-1} = p\lambda \quad (4.21)$$

y para el estado interno 1:

$$[\mathbb{A}_1]_{s,s'} = \frac{\lambda}{2} [\delta_{s,s'-2} + \delta_{s,s'+2} - 2\delta_{s,s'}] \quad \forall \quad s, s' \quad (4.22)$$

Los parámetros γ_i se miden en unidades de la tasa de transición entre sitios de la cadena λ y la capacidad ‘olfativa’ o de ‘detección’ es regulada por el parámetro p . Este modelo puede generalizarse en forma directa para incluir $N \geq 2$ inhomogeneidades (simétricas o asimétricas).

Presentamos abajo el resultado (en el espacio de Laplace) para la *probabilidad de supervivencia* (ec. 4.16) obtenida a partir de la *técnica de la inhomogeneidad local*,

$$\begin{aligned}\hat{\Phi}^{II}(0, u|s_0, 0) &= \frac{1}{u} \left(1 - \frac{\hat{P}_{Mar}(0, u|s_0, 0)}{\hat{P}_{Mar}(0, u|0, 0)} \right) \\ &= \left(1 - \frac{\hat{P}_{Mar}(s_0, u)\Delta_1 + [\hat{P}_{Mar}(s_0 + 1, u) + \hat{P}_{Mar}(s_0 - 1, u)]\Delta_2}{\hat{P}_{Mar}(0, u)\Delta_1 + 2\hat{P}_{Mar}(1, u)\Delta_2} \right)\end{aligned}\quad (4.23)$$

$$\begin{aligned}\Delta_1 &= \hat{P}_{Mar}(0, u) + \hat{P}_{Mar}(2, u) - \frac{1}{u+1} [\alpha\hat{P}_{Mar}(2, u) + (1-\alpha)\hat{P}_{Mar}(1, u)] - \\ &\quad - \frac{1}{u+1} \{ \alpha[\hat{P}_{Mar}(0, u) + \hat{P}_{Mar}(4, u)] + (1-\alpha)[p\hat{P}_{Mar}(1, u) + (1-p)\hat{P}_{Mar}(3, u)] \} \\ \Delta_2 &= \frac{1}{u+1} \left\{ \frac{\alpha}{2} [\hat{P}_{Mar}(1, u) + \hat{P}_{Mar}(3, u)] + \right. \\ &\quad \left. + (1-\alpha)[p\hat{P}_{Mar}(0, u) + (1-p)\hat{P}_{Mar}(2, u)] \right\} - \hat{P}_{Mar}(1, u).\end{aligned}\quad (4.24)$$

La probabilidad marginal $\hat{P}_{Mar}(s, u|0, 0) \equiv \hat{P}_{Mar}(s, u)$ se obtiene de:

$$\hat{P}_{Mar}(s, u) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\cos sk}{1 + u - [(1-\alpha)\cos k + \alpha\cos 2k]} dk. \quad (4.25)$$

Recordamos que la *optimización* de la estrategia intermitente de búsqueda consiste en hallar los valores γ_i (ecuaciones (6.1) y (6.2)), o equivalentemente los valores de α (ec. (4.13)), tales que la *probabilidad de supervivencia* del blanco al tiempo t sea *mínima*.

4.3. Ilustraciones

En este apartado ilustramos y presentamos la interpretación de los resultados obtenidos en las secciones anteriores. Las expresiones analíticas fueron obtenidas en el espacio de Laplace y sus antitransformadas calculadas numéricamente [48, 69, 70]. Para evaluar la exactitud y complementar los resultados teóricos realizamos simulaciones tipo Monte Carlo (MC). En relación a las simulaciones, el proceso generado es el siguiente: en $t = 0$ un ensamble de buscadores/caminantes comienza la búsqueda en una dada posición de la red ($s_0 = 5$); a cada click del reloj el caminante elige saltar hacia primeros vecinos (estado 2) o hacia segundos vecinos (estado 1) con una probabilidad $1 - \alpha$ o α respectivamente. Cuando el caminante no está en la zona del ‘rastros’, y cualquiera sea la longitud del salto, este se realiza a izquierda o derecha con probabilidad $1/2$. En la zona de las inhomogeneidades las probabilidades de salto (en el estado 2) a izquierda o derecha se modifican según las ecuaciones (4.18), (4.19), (4.20) y (4.21). El blanco (inmóvil) se encuentra en $s = 0$. Los promedios se realizan sobre un total de 10^6 realizaciones y los tiempos son medidos en términos de la constante de difusión de los buscadores, λ .

Las tasas de transición entre estados del caminante γ_i , se consideran *bajas* o *altas* en forma relativa a la constante de difusión determinada por los propagadores \mathbb{A}_i (λ) [68]. Concretamente, tasas bajas significa $\gamma_i < \lambda$ y altas $\gamma_i > \lambda$. Una interpretación equivalente consiste en considerar el tiempo medio de permanencia del buscador en el estado i (γ_i^{-1}); este será *largo* (*corto*) en la escala de tiempo λ^{-1} del propagador \mathbb{A}_i , si $\gamma_i^{-1} > \lambda^{-1}$ ($\gamma_i^{-1} < \lambda^{-1}$).

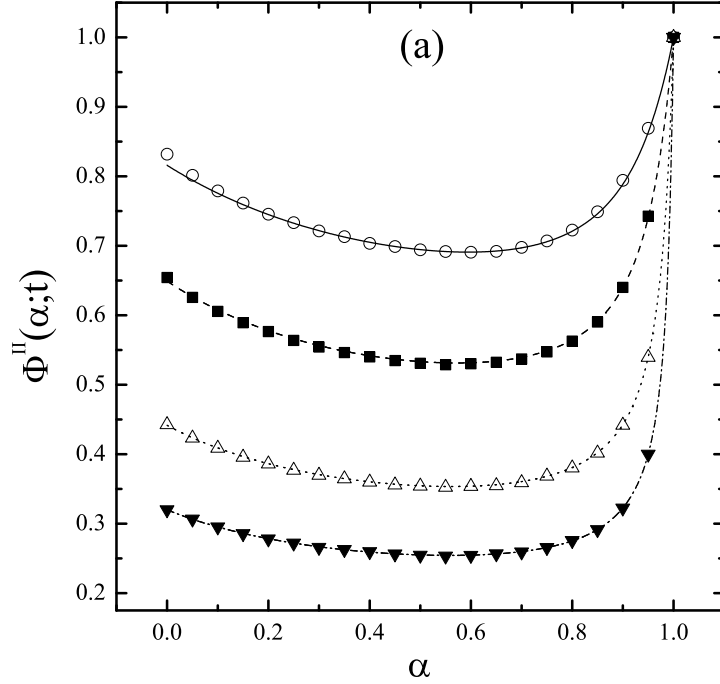


Figura 4.3: **(a)** Resultados analíticos-numéricos (líneas) y simulaciones Monte Carlo (símbolos) correspondientes a la probabilidad de supervivencia $\Phi^{II}(\alpha; t)$ en función de α para diferentes tiempos (\circ - $t = 10$, \blacksquare - $t = 20$, \triangle - $t = 50$, \blacktriangledown - $t = 100$) y para una “capacidad de detección” $p = 0.9$

En la figura 4.3 presentamos curvas correspondientes a la probabilidad de supervivencia $\Phi^{II}(\alpha; t)$ como función de α . En el panel **(a)** analizamos, para diferentes tiempos ($t = 10, 20, 50, 100$), y una “capacidad de detección” $p = 0.9$, es decir, una excelente habilidad para captar ‘rastros u olores’ (caso fuertemente atractivo). En el panel **(b)** analizamos para un tiempo fijo ($t = 20$), y para diferentes “capacidades de detección”: $p = 0.1, 0.4$, correspondientes a casos en los que el blanco deja un rastro que ‘despista’ o ‘repele’ al buscador de su entorno (rastro negativo); y $p = 0.9$, que corresponde a la situación de un rastro ‘positivo’ que guía al buscador hacia el blanco. Los resultados muestran la tendencia que es de esperar en estas situaciones: cuando el buscador ha desarrollado una *buena* capacidad de detección ($p > 0.5$) incrementa sus posibilidades de atrapar el blanco. Si, en cambio, sus habilidades son *pobres* ($p < 0.5$) la probabilidad de supervivencia del blanco crece.

Observamos que la *búsqueda intermitente* mejora la probabilidad de detección, es decir,

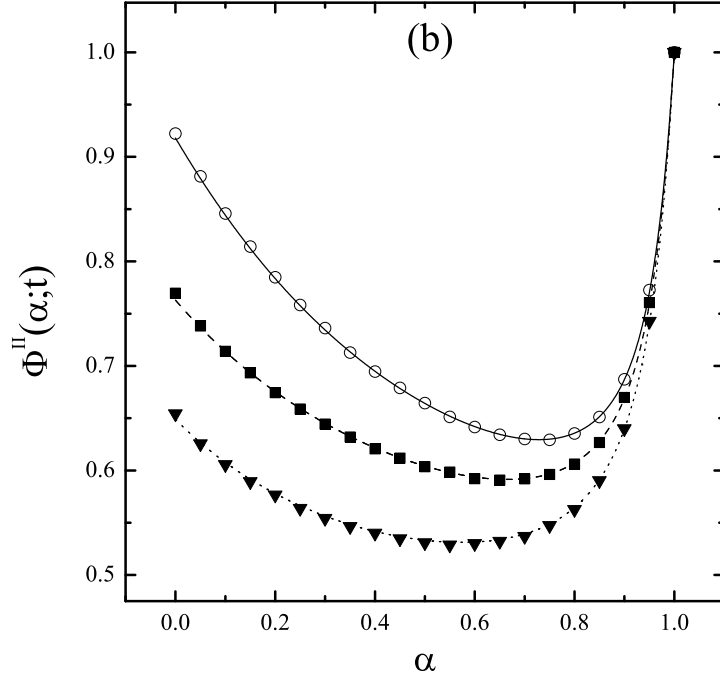


Figura 4.3: **(b)** Resultados analítico-numéricos (líneas) y simulaciones Monte Carlo (símbolos) correspondientes a la probabilidad de supervivencia $\Phi^{II}(\alpha; t)$ en función de α para un tiempo fijo ($t = 20$) y para diferentes capacidades de detección: \circ - $p = 0.1$; \blacksquare - $p = 0.4$, y \blacktriangledown - $p = 0.9$.

minimiza la probabilidad de supervivencia del blanco, en comparación a la *búsqueda monoestado* ($\gamma_1 = 0 \rightarrow \alpha = 0$ y $\gamma_2 = 0 \rightarrow \alpha = 1$), inclusive para el caso de habilidades reducidas ($p < 0.5$). Esto confirma la robustez del *esquema intermitente de búsqueda* [41] puesto que, como puede verse en ambas figuras, la $\Phi^{II}(\alpha; t)$ siempre presenta un valor mínimo en función de α . Recalcamos que el valor de α que minimiza $\Phi^{II}(\alpha; t)$ define la relación entre γ_1 y γ_2 que *optimiza* la estrategia de búsqueda. Es importante resaltar el excelente acuerdo entre las soluciones analítico-numéricas y las simulaciones de Monte Carlo.

En la figura 4.4 mostramos la dependencia de las curvas $\Phi^{II}(\alpha; t)$ vs α respecto a la extensión de la inhomogeneidad. El panel **(a)** corresponde a $p = 0.1$ (rastros ‘negativo’), para inhomogeneidades en los intervalos $[-1, 1]$, $[-2, 2]$, $[-4, 4]$, y $[-9, 9]$; mientras que en el panel **(b)** presentamos el caso $p = 0.9$ (rastros ‘positivo’), para los mismos intervalos de la situación anterior. En ambos paneles el tiempo máximo de evolución se fijó en $t = 20$.

Para un número fijo de inhomogeneidades, la ventaja de las excursiones a la *fase de relocalización* es considerablemente mayor para el caso de rastros ‘negativo’ que para el de rastros ‘positivo’. En la figura 4.5 presentamos varios ejemplos de este comportamiento. Observamos también que el *mínimo* en la *probabilidad de supervivencia* desaparece para extensiones grandes de la inhomogeneidad; este comportamiento está estrechamente relacionado a la posición inicial del caminante.

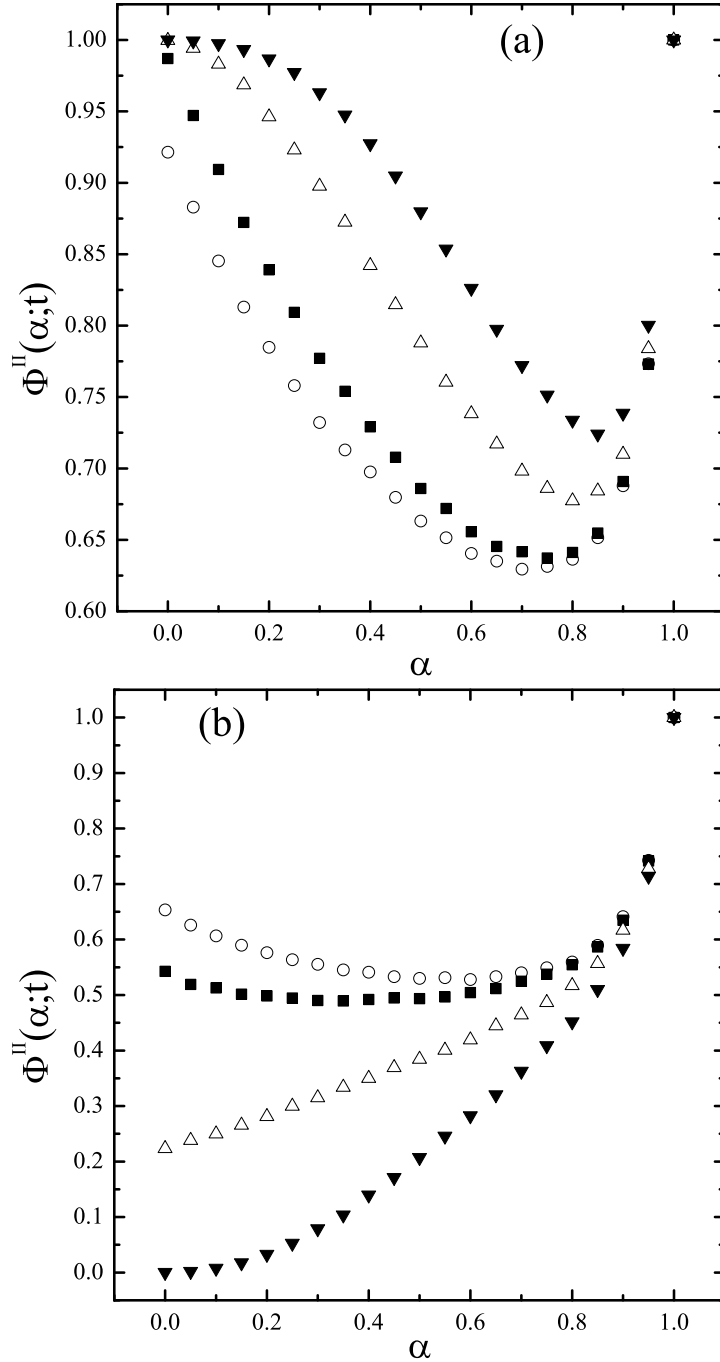


Figura 4.4: Dependencia de la Probabilidad de Supervivencia (*vs* α) respecto a la extensión de la inhomogeneidad y a la capacidad de detección p . Los datos (obtenidos via simulaciones MC) corresponden a los intervalos: $[-1, 1]$ (\circ), $[-2, 2]$ (\blacksquare); $[-4, 4]$ (\triangle), y $[-9, 9]$ (\blacktriangledown). En (a) presentamos el caso $p = 0.1$ y en (b) el caso $p = 0.9$

En la figura 4.5 presentamos el *mínimo* de la probabilidad de supervivencia (que se alcanza en α_{Opt}) como función de la capacidad de “detección” p , para diferentes exten-

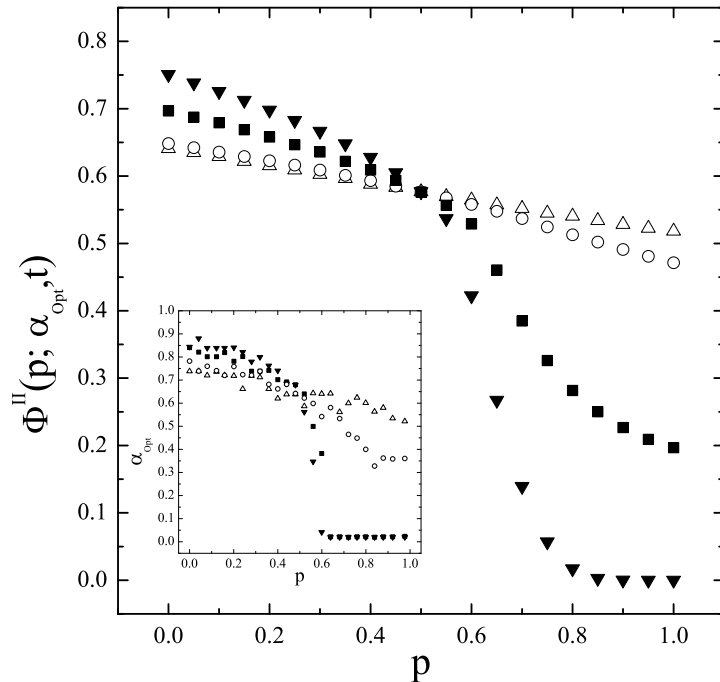


Figura 4.5: Probabilidad de supervivencia $\Phi^{II}(\alpha_{Opt}; t)$ (α_{Opt} : probabilidad de transición que *minimiza* la SP) como función de la capacidad de “detección” p para diferentes extensiones del ‘rastros’: $[-1, 1]$ (Δ), $[-2, 2]$ (\circ); $[-4, 4]$ (\blacksquare), y $[-9, 9]$ (\blacktriangledown). Inset: α_{Opt} también como función de la capacidad de “detección” p y para diferentes extensiones del ‘rastros’. Los resultados presentados corresponden a simulaciones de Monte Carlo.

siones del ‘rastros’. En el inset que acompaña dicha figura, graficamos α_{Opt} como función de la capacidad de “detección” p y para diferentes extensiones del ‘rastros’. En todas las situaciones se fijó un tiempo de evolución $t = 20$. Si bien las curvas presentan un comportamiento monótono, la extensión del rastros juega un rol importante: a medida que este crece, y para el caso de un rastros ‘pobre’ (capacidad de detección reducida, $p < 0,5$), el valor óptimo de α tiende a crecer mientras que la SP se mantiene esencialmente constante. Este resultado es de esperar puesto que para capturar el blanco, el caminante debe ‘evitar’ el efecto ‘repulsivo’ lo que logra permaneciendo en el estado 1 ($\alpha \sim 1$). Para valores mayores de $p > 0,5$, y si la inhomogeneidad es pequeña, observamos que existe un valor óptimo de α (distinto de la búsqueda monoestado - $\alpha \neq 0, 1$) que minimiza la SP sin reducirla a 0. Al extenderse el ‘rastros’, se privilegia la búsqueda monoestado ($\alpha = 0$) y la SP del blanco se reduce a 0.

4.4. Conclusiones del capítulo

En este Capítulo presentamos una extensión al modelo original (introducido en los capítulos 2 y 3) a partir de la consideración de las señales (‘rastros’, ‘olores’, etc.) que puede

4.4. CONCLUSIONES DEL CAPÍTULO

dejar un blanco en su entorno. El esquema utilizado se basó en el formalismo de *caminatas aleatorias multiestado* [56] y en la *técnica de la inhomogeneidad local* [57, 63, 64]. Si bien caracterizamos la intermitencia entre los estados o *fases* de búsqueda, mediante funciones de densidad del tipo exponencial de parámetros γ_1 y γ_2 (dinámica de primer orden), el enfoque teórico propuesto es general. En forma similar, el esquema de ‘señales’ presentado puede ser generalizado en forma directa para incluir $N \geq 2$ inhomogeneidades (simétricas o asimétricas).

Los resultados obtenidos indican que la *probabilidad de supervivencia* del blanco puede ser considerablemente reducida (aumentada) si el buscador es atraído (o rechazado) por el rastro ‘positivo’ (‘negativo’) dejado por el blanco. Encontramos además que para una ‘capacidad de detección alta’ ($p \sim 1$), aumentar el tamaño de la inhomogeneidad reduce la SP del blanco, mientras que el valor óptimo de α deja de existir.

Se ha avanzado de este modo en el estudio de los procesos de *búsqueda intermitente* incluyendo en su descripción, tanto en forma analítica como a través de simulaciones, las ‘señales’ o ‘rastros’ dejados por el blanco. El modelo presentado en este capítulo es factible de ser resuelto analíticamente, y suficientemente rico como para mostrar la influencia de la ‘capacidad de detección’ del buscador en el proceso de captura mediante *estrategias intermitentes*.

Capítulo 5

Supervivencia y Tiempo medio de vida de un blanco en presencia de N buscadores independientes

5.1. Introducción

Durante el desarrollo de esta tesis surgió la necesidad de generar herramientas que, si bien son de carácter más general que el tema específico de la presente investigación, mostraron ser de gran utilidad para caracterizar adecuadamente las *estrategias de búsqueda*. Hemos desarrollado un formalismo unificado que permite caracterizar la *estadística del tiempo de vida* de un blanco en presencia de un conjunto de buscadores independientes.

La magnitud que hemos definido es el *Tiempo de vida del blanco*, vida que finaliza cuando *el primero* de los caminantes arriba al blanco (sitio trampa) bajo la situación apropiada de captura. El desplazamiento de los caminantes es del tipo difusivo (normal o anómalo) y el proceso de atrapamiento puede tener las características definidas usualmente: ser perfecto (el primer encuentro buscador–blanco termina en captura), imperfecto [71, 72] (un encuentro buscador–blanco no termina necesariamente en captura) y dinámico (la captura depende del estado del blanco) [73, 26]. El enfoque desarrollado no solo provee un marco unificado que comprende las diferentes situaciones de atrapamiento comentadas sino también nos permite evaluar (analítica y numéricamente) el *Tiempo medio de vida del blanco* en forma exacta para un gran número de situaciones prácticas. Además nos permite estudiar de manera sistemática la dependencia del *Tiempo de vida del blanco* con la distribución inicial de caminantes.

La gran mayoría de los aportes recientes relacionados con las *estrategias de búsqueda intermitente* se centran en el análisis de la captura de *un caminante* que difunde en el espacio, en presencia de *conjunto de trampas* (*trapping problem*). La magnitud característica en este tipo de problemas es el *tiempo de búsqueda* [39]. Una aplicación relevante de nuestro formalismo esta relacionada con el *target problem*, en el cual se realiza la búsqueda de

un blanco por un conjunto de buscadores [30, 48].

Procuramos mostrar en el presente capítulo que el *Tiempo medio de vida del blanco* (MTL) es la magnitud adecuada para caracterizar la búsqueda en problemas tipo *target* [30] y situarla en “pie de igualdad” con el *Search Time* (tiempo de búsqueda) [39, 33] utilizado en problemas tipo *trapping* [33]. Particularmente utilizaremos el MTL para describir en forma clara y precisa el concepto de optimización en las *estrategias de búsqueda intermitente*.

La organización del contenido del capítulo es el siguiente: en la sección 5.2 presentamos el formalismo general y definimos los conceptos y magnitudes a utilizar; también establecemos la conexión del problema de N caminantes con el de un *único* caminante. El estudio del *Tiempo del primer pasaje* (FPT) [74] es abordado en la Sec. 5.3 mientras que en la Sec. 5.4 consideramos el efecto de la dimensionalidad y del número de caminantes. En la sección 5.5, nos enfocamos en la distribución espacial inicial de los caminantes y analizamos el límite termodinámico. En el apartado 5.6 presentamos las ilustraciones correspondientes a sistemas discretos y continuos (finitos e infinitos) con diferentes distribuciones iniciales y consideramos el caso de atrapamiento imperfecto. Por último en la sección 5.7 evaluamos la utilidad de nuestro enfoque para caracterizar los esquemas de *búsqueda intermitente* desarrollados en capítulos anteriores. Finalmente, en la sección 5.8 discutimos las conclusiones del presente capítulo.

5.2. Tiempo medio de vida del blanco (MTL)

En esta sección presentamos una breve revisión del formalismo desarrollado en las Ref. [71, 75] y lo generalizamos con el fin de establecer la conexión del problema de N caminantes independientes con el de un *único* caminante. La probabilidad de supervivencia (SP) al tiempo t , $\Phi_N(t)$, de un blanco estático situado en el origen de un sistema de coordenadas, en presencia de N caminantes independientes que se desplazan en un espacio d -dimensional (continuo o discreto) puede escribirse como [75]

$$\Phi_N(t) = \sum_{\vec{s}_1} \dots \sum_{\vec{s}_N} u(\vec{s}_1, \dots, \vec{s}_N) \prod_{i=1}^N \Phi_1(\vec{s}_i, t), \quad (5.1)$$

donde $u(\vec{s}_1, \dots, \vec{s}_N)$ denota la distribución de probabilidad conjunta de encontrar *inicialmente* al primer caminante en la posición \vec{s}_1 , al segundo en \vec{s}_2 y en forma similar con los restantes. $\Phi_1(\vec{s}_i, t)$ es la SP del blanco al tiempo t en presencia de un *único* caminante, ubicado inicialmente en la posición \vec{s}_i . La suma en la ecuación (5.1), recorre todos los sitios de la red, y se transforma en una integral para el caso de difusión en el espacio continuo.

Definimos la densidad correspondiente al tiempo de vida del blanco (target lifetime density - TLD), $F_N(t)$, en presencia de N caminantes, en la forma,

$$F_N(t) = -\frac{d}{dt}\Phi_N(t). \quad (5.2)$$

Utilizando la ecuación (5.1), escribimos [75, 71]

$$F_N(t) = \sum_{\vec{s}_1} \dots \sum_{\vec{s}_N} u(\vec{s}_1, \dots, \vec{s}_N) \sum_{i=1}^N F_1(\vec{s}_i, t) \prod_{j \neq i}^N \Phi_1(\vec{s}_j, t), \quad (5.3)$$

donde $F_1(\vec{s}_i, t)$ es el TLD en presencia de un *único* caminante inicialmente en la posición \vec{s}_i . Esta magnitud se define a partir de $\Phi_1(\vec{s}_i, t)$, en forma análoga a la ec. (5.2),

$$F_1(\vec{s}_i, t) = -\frac{d}{dt} \Phi_1(\vec{s}_i, t). \quad (5.4)$$

Para el caso de atrapamiento perfecto, $F_1(\vec{s}_i, t)$ es la *densidad del tiempo del primer pasaje* por el origen al tiempo t de un caminante ubicado inicialmente en \vec{s}_i . Cuando la densidad $F_1(\vec{s}_i, t)$ esta normalizada, el atrapamiento es certero e identificamos al proceso como *recurrente* [63]. Por otro lado, si $f_1(\vec{s}_i)$ (la probabilidad de alcanzar el origen en algún tiempo para un caminante que parte del sitio \vec{s}_i) satisface:

$$f_1(\vec{s}_i) = \int_0^\infty F_1(\vec{s}_i, t) dt < 1, \quad (5.5)$$

el proceso es llamado *transitorio* [63].

Definimos el *Tiempo medio de vida del blanco* (Mean Target Lifetime - MTL) [76, 77] a través de la TLD como:

$$T_N = \int_0^\infty t F_N(t) dt. \quad (5.6)$$

Si $t \Phi_N(t) \rightarrow 0$ para $t \rightarrow \infty$, también podemos expresar el MTL en función de la SP:

$$T_N = \int_0^\infty \Phi_N(t) dt. \quad (5.7)$$

5.3. Tiempo del primer pasaje (FPT)

Podemos calcular una expresión general para la $\Phi_1(\vec{s}_i, t)$ en términos de la probabilidad condicional $q(\vec{s}, t | \vec{s}_i, t = 0)$ de que un caminante este en \vec{s} al tiempo t , dado que estuvo en \vec{s}_i en $t = 0$, en presencia de una trampa en el origen:

$$\Phi_1(\vec{s}_i, t) = \sum_{\vec{s}} q(\vec{s}, t | \vec{s}_i, t = 0), \quad (5.8)$$

donde la suma se evalúa sobre todos los sitios de la red y se reemplaza por una integral en el caso del espacio continuo.

La probabilidad $q(\vec{s}, t | \vec{s}_i, t = 0)$ contempla en forma *explícita* la presencia de la trampa, lo que permite utilizar la ecuación (1.8) para cualquier tipo de atrapamiento, incluyendo los casos imperfecto y dinámico.

En el caso de atrapamiento perfecto es posible aprovechar, para procesos Markovianos, la conexión entre la densidad de probabilidad del primer arribo (pasaje) por el origen al tiempo t desde el sitio inicial \vec{s}_i , $F_1(\vec{s}_i, t)$, y la probabilidad condicional de encontrar un caminante (*en un sistema sin trampa*) en el sitio \vec{s} al tiempo t , dado que estuvo inicialmente en el sitio \vec{s}_i , $P(\vec{s}, t | \vec{s}_i, t = 0)$ [65],

$$P(\vec{0}, t | \vec{s}_i, t = 0) = \Psi(\vec{s}_i, t) \delta_{\vec{s}_i, \vec{0}} + \int_0^t P(\vec{0}, t | \vec{0}, t') F_1(\vec{s}_i, t') dt', \quad (5.9)$$

donde $\Psi(\vec{s}_i, \tau)$ es la probabilidad que de permanecer en el sitio \vec{s}_i hasta un tiempo τ sin realizar transiciones hacia otros sitios. Para procesos estacionarios se cumple que $P(\vec{s}, t | \vec{0}, t') = P(\vec{s}, t - t' | \vec{0}, t = 0)$ y la integral en la ecuación (5.9) se convierte en una convolución. Transformando en Laplace la ec. (5.9) obtenemos:

$$\hat{F}_1(\vec{s}_i, u) = \frac{\hat{P}(\vec{0}, u | \vec{s}_i, t = 0) - \hat{\Psi}(\vec{s}_i, u) \delta_{\vec{s}_i, \vec{0}}}{\hat{P}(\vec{0}, u | \vec{0}, t = 0)}, \quad (5.10)$$

donde denotamos por un acento circunflejo la transformada de Laplace.

Utilizando las ecuaciones (5.4) y (5.10), la condición inicial $\Phi_1(\vec{s}_i, t = 0) = 1$, y tomando $\vec{s}_i \neq \vec{0}$, obtenemos finalmente la transformada de Laplace de la SP de un blanco en presencia de un *único* caminante,

$$\hat{\Phi}_1(\vec{s}_i, u) = \frac{\hat{P}(\vec{0}, u | \vec{0}, t = 0) - \hat{P}(\vec{0}, u | \vec{s}_i, t = 0)}{u \hat{P}(\vec{0}, u | \vec{0}, t = 0)}. \quad (5.11)$$

En forma similar a la ec.(5.7), podemos escribir el *tiempo medio del primer pasaje* (MFPT) para un caminante como,

$$T = T_1 = \int_0^\infty \Phi_1(t) dt. \quad (5.12)$$

5.4. MTL en d -dimensiones

Si el atrapamiento es perfecto, el MTL coincide con el MFPT para el *primero* del conjunto de N caminantes en llegar al blanco. Cuando el MFPT de un único caminante no tiene un valor finito, es decir, cuando la integral en la ecuación ec. (5.12) diverge, naturalmente surge la pregunta de si existe un número mínimo de caminantes (independiente de su posición inicial) tal que el MTL sea finito [78].

La respuesta a este interrogante requiere encontrar un N para el cual la integral

$$\int_0^\infty \prod_{i=1}^N \Phi_1(\vec{s}_i, t) dt, \quad (5.13)$$

converja. Utilizando el presente formalismo reobtenemos (y generalizamos) en forma directa resultados conocidos [78] en este tema.

En esta sección, y para la obtención de resultados concretos, suponemos que los caminantes poseen una dinámica tipo *caminata aleatoria de tiempo continuo* (CTRW) [56, 57]. El formalismo para las CTRW permite evaluar en forma analítica la probabilidad de supervivencia del blanco en presencia de un caminante a través de las siguientes expresiones:

$$\hat{P}(\vec{s}, u | \vec{0}, t = 0) = \frac{1 - \hat{\psi}(u)}{u} G(\vec{s}, \hat{\psi}(u)), \quad (5.14)$$

donde $\hat{\psi}(u)$ es la transformada de Laplace de la *densidad de probabilidad del tiempo de espera* (waiting time probability density), $\psi(t)$, y $G(\vec{s}, z)$ es la función de Green asociada a la red. En d -dimensiones $G(\vec{s}, z)$ esta dada por,

$$G(\vec{s}, z) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{-\pi}^{\pi} \cdots \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\exp(-i\vec{s} \cdot \vec{k})}{1 - z \Lambda(\vec{k})} d^d k, \quad (5.15)$$

donde $\Lambda(\vec{k})$ es el factor de estructura de la red subyacente. Para una caminata simétrica en una red cúbica simple d -dimensional obtenemos $\Lambda(\vec{k}) = (\cos k_1 + \cdots + \cos k_d)/d$, donde k_i es la i -ésima componente del vector \vec{k} .

Suponiendo que $\hat{\psi}(u) \rightarrow 1$ para $u \rightarrow 0$, el comportamiento de $G(\vec{s}, \hat{\psi}(u))$ viene dado por los valores de \vec{k} tales que $\Lambda(\vec{k}) \approx 1$, es decir, $|\vec{k}| \ll 1$. En esta aproximación, $\cos k_i \approx 1 - k_i^2/2$ y $\Lambda(\vec{k}) = 1 - |\vec{k}|^2/(2d)$. Por lo tanto, sólo necesitamos considerar la expansión $\exp(-i\vec{s} \cdot \vec{k}) \approx 1 - i\vec{s} \cdot \vec{k} - (\vec{s} \cdot \vec{k})^2/2$ en el numerador de la ec. (5.15). En el límite $u \rightarrow 0$, obtenemos $G(\vec{s}, \hat{\psi}(u)) \approx G(\vec{0}, \hat{\psi}(u)) - K_d(\vec{s}, \hat{\psi}(u))$, donde

$$K_d(\vec{s}, \hat{\psi}(u)) = \frac{1}{2(2\pi)^d} \times \int_{-\pi}^{\pi} \cdots \int_{-\pi}^{\pi} \frac{(\vec{s} \cdot \vec{k})^2 d^d k}{1 - \hat{\psi}(u) + \hat{\psi}(u) k^2/(2d)}. \quad (5.16)$$

Para una caminata aleatoria en un espacio homogéneo y sin fronteras, se cumple que $P(\vec{s}, t | \vec{s}_i, t = 0) = P(\vec{s} - \vec{s}_i, t | \vec{0}, t = 0)$. Utilizando estos resultados en la ec. (5.11), obtenemos

$$\hat{\Phi}_1(\vec{s}_i, u) \approx \frac{K_d(\vec{s}_i, \hat{\psi}(u))}{u G(\vec{0}, \hat{\psi}(u))}, \quad (5.17)$$

donde hemos hecho uso de la ecuación (5.14) y la invariancia traslacional de una caminata tipo CTRW en una red infinita ($P(\vec{0}, t | \vec{s}, t = 0) = P(\vec{s}, t | \vec{0}, t = 0)$).

$K_d(\vec{s}, z)$ se mantiene finita en $z = 1$ puesto que el factor k^2 compensa la singularidad en el denominador. Por otro lado, la singularidad en $z = 1$ de $G(\vec{0}, z)$ depende de la dimensionalidad de la red involucrada. Una buena aproximación para estudiar la singularidad de la ecuación (5.15) resulta de evaluar las integrales sobre la bola d -dimensional de radio π que se encuentra inscrita en la primera zona de Brillouin. En el límite $u \rightarrow 0$ tenemos que,

$$G(\vec{0}, \hat{\psi}(u)) \approx \frac{d C_d}{(2\pi)^d} \int_0^\pi \frac{k^{d-1} dk}{1 - \hat{\psi}(u) + \hat{\psi}(u) k^2/(2d)}, \quad (5.18)$$

donde $C_d = \pi^{d/2}/\Gamma(d/2 + 1)$.

Para el caso de difusión normal, la *waiting time probability density* viene dada por $\psi(t) = \lambda \exp(-\lambda t)$ [57]. Por lo que,

$$\hat{\psi}(u) = \left(1 + \frac{u}{\lambda}\right)^{-1}, \quad (5.19)$$

y obtenemos para $u \rightarrow 0$, $\hat{\psi}(u) \approx 1 - u/\lambda$.

Para el caso de difusión anómala el comportamiento asintótico viene dado por $\hat{\psi}(u) \approx 1 - \lambda^{-\alpha} u^\alpha$, con $0 < \alpha < 1$; de aquí surge que la situación de difusión normal es el caso de divergencia ‘más severo’ para la divergencia de $G(\vec{0}, z)$ en $z = 1$.

5.4.1. Una dimensión ($d = 1$)

Para $d = 1$, $C_1 = 2$, obtenemos (por integración directa) de la ec. (5.18)

$$G(\vec{0}, \hat{\psi}(u)) \approx \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{(1 - \hat{\psi}(u))\hat{\psi}(u)/2}} \arctan \left(\pi \sqrt{\frac{\hat{\psi}(u)/2}{1 - \hat{\psi}(u)}} \right). \quad (5.20)$$

En el límite $u \rightarrow 0$, $\hat{\psi}(u)/(1 - \hat{\psi}(u)) \rightarrow \infty$ y el último factor de la ecuación (5.20) tiende a $\pi/2$. Por lo que, para difusión normal,

$$G(\vec{0}, \hat{\psi}(u)) \approx \frac{1}{\sqrt{2(1 - \hat{\psi}(u))}} \propto u^{-1/2}. \quad (5.21)$$

A partir de la ec. (5.17) resulta que $\hat{\Phi}_1(\vec{s}_i, u) \propto u^{-1/2}$ y utilizando un teorema Tauberiano [56, 77] obtenemos en forma inmediata en el dominio temporal que $\Phi_1(\vec{s}_i, t) \propto t^{-1/2}$. Por lo tanto la ecuación (5.12) diverge y la convergencia de la ec. (5.13) se logra sólo si $N > 2$. Este resultado también es válido para atrapamiento imperfecto [71, 72] o dinámico [73, 26].

5.4.2. Dos dimensiones ($d = 2$)

Para $d = 2$, $C_2 = \pi$, y por integración directa de la ec. (5.18) obtenemos

$$G(\vec{0}, \hat{\psi}(u)) \approx \frac{1}{\pi \hat{\psi}(u)} \ln \left(1 + \frac{\pi^2 \hat{\psi}(u)}{4(1 - \hat{\psi}(u))} \right). \quad (5.22)$$

En el límite $u \rightarrow 0$, $G(\vec{0}, \hat{\psi}(u)) \approx -\ln(1 - \hat{\psi}(u))/\pi \propto -\ln u$, $\hat{\Phi}_1(\vec{s}_i, u) \propto -1/(u \ln u)$ y $\Phi_1(\vec{s}_i, t) \propto \ln t$. Por lo que la convergencia de la ecuación (5.13) no se alcanza para ningún valor de finito N .

5.4.3. $d \geq 3$

Si $d \geq 3$, $G(\vec{0}, \hat{\psi}(u))$ se mantiene finita cuando $u \rightarrow 0$ puesto que el factor k^{d-1} en el numerador evita la singularidad en el denominador de la ecuación (5.18) y de la ec. (5.17), $\hat{\Phi}_1(\vec{s}_i, u) \propto 1/u$. Este resultado también puede ser obtenido a partir de la ecuaciones (5.4) y (5.5). El comportamiento asintótico de la probabilidad de supervivencia resulta:

$$\Phi_1(\vec{s}_i, t \rightarrow \infty) = 1 - \int_0^{t \rightarrow \infty} F_1(s_i, t') dt' = 1 - f_1(\vec{s}_i). \quad (5.23)$$

Observamos que a tiempos ‘largos’ la SP se asintotiza a un valor independiente de t y el proceso resulta ‘transitorio’ [63] ($0 < f_1(\vec{s}_i) < 1$) para $d \geq 3$. Cada factor en la ecuación (5.13) toma valores $0 < 1 - f_1(s_i) < 1$ y, por lo tanto, la ecuación (5.13) diverge para todo valor de N .

Resaltemos que, a pesar que el MFPT diverge para $d \geq 3$, el límite asintótico de la probabilidad de supervivencia del blanco (que es proporcional a $\prod_{i=1}^N (1 - f_1(\vec{s}_i))$ siendo cada factor menor que uno) decrece monotonamente con N , independientemente de la distribución inicial de los caminantes.

Alternativamente al presente planteo, podemos proceder en forma similar a lo desarrollado en la Ref. [78] eligiendo sólo aquellos caminantes que llegaran alguna vez al blanco. Para este propósito es necesario definir la densidad de probabilidad condicional de arribar al origen (posición del blanco) al tiempo t desde el sitio inicial \vec{s}_i , dado que el caminante llegará allí con certeza: $F_1(\vec{s}_i, t)/f_1(\vec{s}_i)$. Utilizando esta probabilidad condicional encontramos en $d = 3$ una expresión equivalente a la ec. (5.21) y entonces el MTL toma un valor finito si al menos tres caminantes eventualmente llegan al origen (posición del blanco).

5.5. Distribuciones iniciales conjuntas

Consideramos la influencia en la TLD y el MTL de diferentes distribuciones iniciales de caminantes ($u(\vec{s}_1, \dots, \vec{s}_N)$). Un gran número de casos estudiados en la literatura [79, 80, 81] pertenecen a las siguientes distribuciones:

5.5.1. Concentrada

Todos los caminantes comienzan en el mismo punto del espacio:

$$u(\vec{s}_1, \dots, \vec{s}_N) = \prod_{i=1}^N \delta_{\vec{s}_i, \vec{s}_0}, \quad (\vec{s}_0 \neq \vec{0}). \quad (5.24)$$

En este caso, utilizando la ecuación (5.1) obtenemos

$$\Phi_N^{con}(t) = (\Phi_1(\vec{s}_0, t))^N, \quad (5.25)$$

y, a partir de la ec. (5.3), resulta

$$F_N^{con}(t) = N F_1(\vec{s}_0, t) (\Phi_1(\vec{s}_0, t))^{N-1} . \quad (5.26)$$

Recordando que $\Phi_1(\vec{s}_0, t) = 1 - \int_0^t F_1(\vec{s}_0, \tau) d\tau$, podemos comparar la última ecuación con la ec. (19) en la Ref.[81].

5.5.2. Sitios igualmente probables (distribución uniforme)

En forma alternativa, el sitio inicial de cada caminante puede ser elegido con igual probabilidad entre M sitios de un dado conjunto \mathcal{S} ,

$$u(\vec{s}_1, \dots, \vec{s}_N) = \begin{cases} M^{-N} & \text{para todos los } \vec{s}_i \in \mathcal{S}, \\ 0 & \text{de otro modo,} \end{cases} \quad (5.27)$$

donde \mathcal{S} es tal que $\vec{0} \notin \mathcal{S}$. Utilizando esta distribución en la ecuación (5.1) resulta

$$\Phi_N^{els}(t) = \left(\frac{1}{M} \sum_{\vec{s} \in \mathcal{S}} \Phi_1(\vec{s}, t) \right)^N . \quad (5.28)$$

También podemos expresar la ec. (5.28) en la forma $\Phi_N^{els}(t) = \langle (\Phi_1(\vec{s}, t))^N \rangle$, donde $\langle \dots \rangle$ denota el promedio espacial tomado en el conjunto \mathcal{S} . La Ec.(5.28) puede expresarse también como:

$$\Phi_N^{els}(t) = \left(1 - \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M (1 - \Phi_1(\vec{s}_i, t)) \right)^N , \quad (5.29)$$

donde los \vec{s}_i ($i = 1, \dots, M$) indican las posiciones de los M sitios del conjunto \mathcal{S} . Particularmente resaltamos que no existe restricción alguna entre N y M y, por lo tanto, utilizando la ecuación (5.29) podemos evaluar los límites $N \rightarrow \infty$, $M \rightarrow \infty$, con $N/M \rightarrow \rho$ constante (*límite termodinámico*). En este límite obtenemos

$$\Phi_\beta^{els}(t) = \exp(-\rho S(t)) , \quad (5.30)$$

donde

$$S(t) = \sum_{\vec{s} \neq \vec{0}} (1 - \Phi_1(\vec{s}, t)) , \quad (5.31)$$

es el *número medio de sitios distintos visitados* por un caminante hasta el tiempo t . Suponemos que la serie en la ecuación (5.31) converge.

La generalización de la ecuación (5.28) al espacio continuo d -dimensional, suponiendo que \mathcal{S} tiene un volumen finito V y que cada caminante comienza distribuido en forma uniforme en V , es

$$\Phi_N^{els}(t) = \left(\frac{1}{V} \int_{\mathcal{S}} \Phi_1(\vec{s}, t) d^d s \right)^N . \quad (5.32)$$

Si el número de caminantes por unidad de volumen $c = N/V$ es constante, obtenemos en el límite ($N \rightarrow \infty$ y $V \rightarrow \infty$)

$$\Phi_c^{els}(t) = \exp \left(-c \int (1 - \Phi_1(\vec{s}, t)) d^d s \right), \quad (5.33)$$

5.6. Ilustraciones

5.6.1. Cadenas finita y semi-infinita

En esta sección calculamos el MTL para el caso de atrapamiento perfecto cuando N caminantes realizan una caminata aleatoria simétrica con transiciones a primeros vecinos y con un tiempo medio de salto $1/\lambda$.

Cadena Finita

Para el caso de una cadena finita de L sitios con un extremo absorbente en el origen y uno reflectante en el sitio L , existe una expresión exacta para la transformada de Laplace de la densidad del *tiempo del primer pasaje* (FPTD) [82],

$$\hat{F}_1(j, u) = \frac{R(u)^j + R(u)^{2L+1-j}}{1 + R(u)^{2L+1}}, \quad (5.34)$$

($j = 1, 2, \dots, L$) donde $R(u) = (r + 1 - \sqrt{r^2 + 2r})$ y $r = u/\lambda$. La antitransformada de Laplace de esta expresión puede obtenerse en forma exacta [83], sin embargo para utilizar las ecuaciones (5.25) o (5.28) es necesario realizar previamente la integración involucrada en la ecuación (5.2) y posteriormente evaluar la integral en la ecuación (5.7). Dada la complejidad del procedimiento hemos evaluado numéricamente estas integrales [83].

En la Fig. 5.1 graficamos T_N para una cadena de $L = 10$ y una distribución inicial de caminantes dada por las ecuaciones (5.24) y (5.27). Encontramos en ambos casos un comportamiento de ley de potencia (ver la relación cuasi-lineal en el gráfico log-log) para casi todos los valores de N . A modo de comparación incluimos en la Fig. 5.1 los resultados correspondientes a la cadena semi-infinita, con todos los caminantes inicialmente concentrados en los sitios $s = 1$ y $s = 10$.

Cadena Semi-infinita

Para la cadena semi-infinita es posible obtener, a partir de las referencias [84, 71], una expresión explícita para $\Phi_1(j, t)$ ($j = 1, 2, \dots$)

$$\Phi_1(j, t) = e^{-\lambda t} (I_0(\lambda t) - I_j(\lambda t)) + 2e^{-\lambda t} \sum_{k=1}^j I_k(\lambda t), \quad (5.35)$$

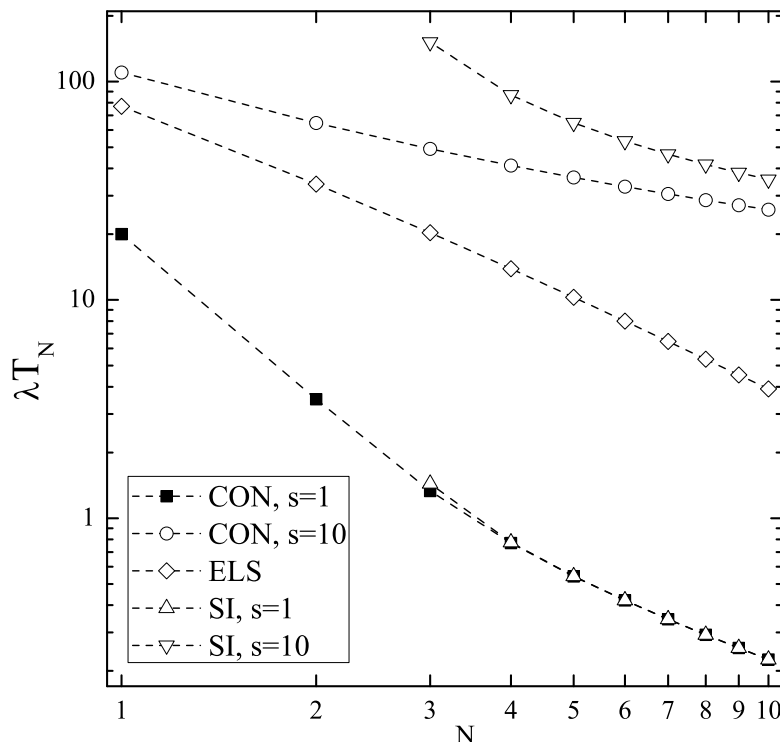


Figura 5.1: T_N como función del número N de caminantes para una cadena con una trampa en el origen. El caso finito corresponde a $L = 10$ sitios y dos distribuciones iniciales diferentes: Concentrados (CON), en el sitio $s = 1$ o el sitio $s=10$; y con todos los sitios igualmente probables (distribución uniforme) (ELS). El caso semi-infinito (SI) corresponde a todos los caminantes inicialmente concentrados, en $s = 1$ o en el sitio $s = 10$. Las líneas de puntos son sólo una guía para el ojo.

donde las $I_k(x)$ son las funciones modificadas de Bessel. Utilizando (5.35) en las ecuaciones (5.25) o (5.30) e integrando numéricamente [83] la ec. (5.7), evaluamos el *tiempo medio de vida del blanco* para las distribuciones iniciales dadas en las ecs. (5.24) y (5.27).

En la figura 5.2 graficamos el MTL para el caso en que los caminantes están inicialmente distribuidos en la cadena con una concentración ρ e incluimos también los resultados correspondientes a la cadena finita de $L = 10$ sitios. En esta figura la semejanza (para valores de $\rho \sim 1$) se produce en los casos de cadena finita y semi-infinita para una distribución ELS.

En las figuras siguientes, el número mínimo de caminantes para obtener un valor finito de T_N es tres (ver sección 5.4.1). Resaltamos la semejanza entre los resultados, para el caso de una distribución inicial de caminantes concentrados, de la cadena finita y la semi-infinita (inclusive para valores de N no demasiado grandes).

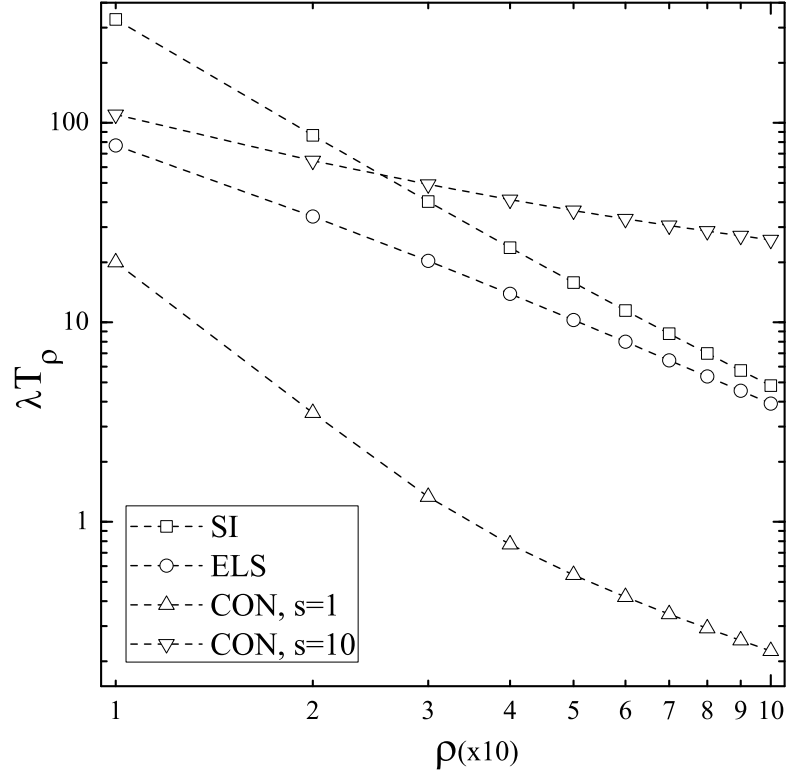


Figura 5.2: T_ρ como función de la concentración de caminantes ρ , para una cadena con un blanco en el origen. El caso semi-infinito (SI) corresponde al límite termodinámico y el finito corresponde a $L = 10$ sitios ($\rho = N/L$) y todos los caminantes inicialmente concentrados (CON), en el sitio $s = 1$ o en $s = 10$; o todos los sitios igualmente probables (ELS). Las líneas de puntos son solo una guía para el ojo.

5.6.2. MTL en el límite termodinámico en d -dimensiones

La probabilidad de supervivencia para el caso de atrapamiento perfecto en redes d -dimensionales viene dado, en el límite termodinámico, por la ecuación (5.30). Utilizando (5.30) en la ecuación (5.7) podemos escribir el MTL en la forma:

$$T_\rho = \int_0^\infty \exp(-\rho S(t)) dt. \quad (5.36)$$

Para una dinámica tipo CTRW, es posible demostrar que la transformada de Laplace de $S(t)$ puede expresarse como [85]:

$$\hat{S}(u) = \frac{\hat{\psi}(u)}{u^2 P(\vec{0}, u | \vec{0}, t = 0)}, \quad (5.37)$$

donde $\hat{\psi}(u)$ se obtiene de la ecuación (5.19).

Utilizando expresiones conocidas ([63]) para la $P(\vec{0}, u | \vec{0}, t = 0)$ graficamos, en la Fig. (5.3), T_ρ como función de ρ para diferentes redes: en $d = 1$ (cadena), $d = 2$ (red:

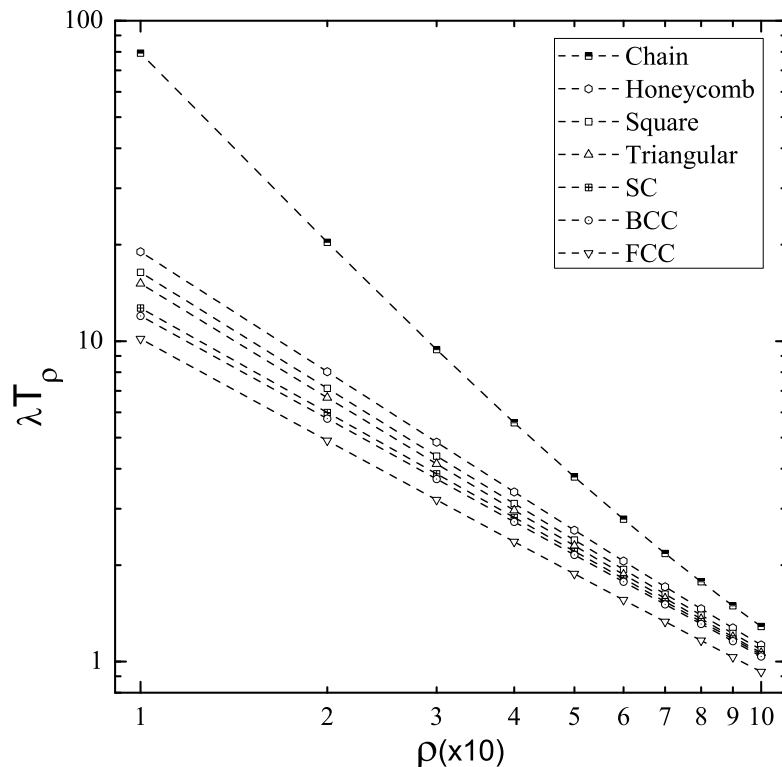


Figura 5.3: T_ρ como función de la concentración de caminantes(ρ) en el límite termodinámico, para diferentes redes. El número de coordinación de las redes, de arriba hacia abajo es, $\kappa = 2, 3, 4, 5, 6, 8, 12$.

hexagonal, cuadrada, y triangular), y en $d = 3$ (SC-cúbica simple, BCC -cúbica centrada en el cuerpo, y FCC-cúbica centrada en las caras). T_ρ muestra una relación cuasi-lineal en el gráfico log-log y decrece en forma monótona a medida que el número de coordinación κ de la red se incrementa.

5.6.3. Atrapamiento imperfecto en el espacio continuo

Un problema de interés práctico que puede resolverse a partir del formalismo presentado es el de la línea semi-infinita con una trampa “imperfecta” en el origen. La densidad de probabilidad $q(x, t|x_0, t = 0)$ (en presencia de la trampa) de encontrar a la partícula en la posición x al tiempo t , dado que estuvo en la posición x_0 al tiempo $t = 0$, satisface la ecuación de difusión,

$$\frac{\partial q}{\partial t} = D \frac{\partial^2 q}{\partial x^2}, \quad (5.38)$$

donde D es el coeficiente de difusión. El carácter de trampa imperfecta es modelado mediante la condición de contorno ‘radiativa’ (radiation boundary condition) [74]

$$\left. \frac{\partial q}{\partial x} \right|_{x=0} = \gamma q(x=0, t|x_0, t=0), \quad (5.39)$$

donde γ cuantifica la eficiencia de la trampa. $\gamma = 0$ corresponde al caso de frontera reflectante (no hay atrapamiento), mientras que en el límite $\gamma \rightarrow \infty$ recuperamos la situación de atrapamiento perfecto. La solución de las ecuaciones (5.38) y (5.39) pueden obtenerse de la Ref. [86]

$$q(x, t|x_0, t=0) = q_a - \gamma q_b, \quad (5.40)$$

donde

$$q_a = \frac{\exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2Dt}\right) + \exp\left(-\frac{(x+x_0)^2}{2Dt}\right)}{2\sqrt{\pi Dt}} \quad (5.41)$$

y

$$q_b = \exp(D\gamma^2 t + \gamma(x+x_0)) \operatorname{erfc}\left(\frac{x+x_0}{2\sqrt{Dt}} + \gamma\sqrt{Dt}\right). \quad (5.42)$$

La relación entre la probabilidad de supervivencia $\Phi_1(x_0, t)$ y $q(x, t|x_0, t=0)$ viene dada por la ecuación (5.8). Por lo tanto, para la situación de atrapamiento imperfecto, obtenemos [87],

$$\Phi_1(x_0, t) = 1 - \operatorname{erfc}\left(\frac{x_0}{2\sqrt{Dt}}\right) + \exp(D\gamma^2 t + \gamma x_0) \operatorname{erfc}\left(\frac{x_0}{2\sqrt{Dt}} + \gamma\sqrt{Dt}\right). \quad (5.43)$$

A partir de (5.43) recuperamos la expresión correspondiente al caso de atrapamiento perfecto ($\gamma \rightarrow \infty$),

$$\Phi_1(x_0, t) = 1 - \operatorname{erfc}\left(\frac{x_0}{2\sqrt{Dt}}\right). \quad (5.44)$$

En la Figura 5.4 graficamos T_N para diferentes valores de la eficiencia de atrapamiento de la trampa (γ) y para una distribución inicial de caminantes concentrados en $x_0 = 1$. Para obtener cada conjunto de puntos utilizamos las ecs. (5.43) y (5.25), y evaluamos en forma numérica [83] la integral en la ec. (5.7). En forma similar al caso discreto, obtenemos para el espacio continuo una relación cuasi-lineal en el gráfico (en escala log-log) T_N vs N .

5.7. MTL en el esquema de búsqueda intermitente

Como ha sido mencionado reiteradamente en este trabajo es posible encontrar *procesos intermitentes* en muchos campos o disciplinas. A modo de ejemplo, citamos el caso de reactivos que difunden libremente en un solvente y que en forma intermitente se acoplan a una superficie [2]. También encontramos un *esquema intermitente* de movimiento en

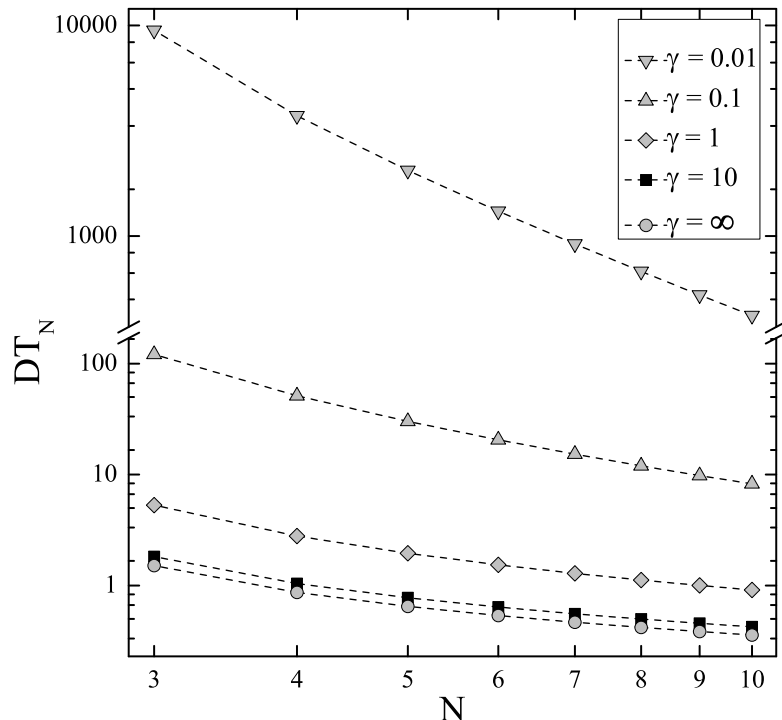


Figura 5.4: T_N como función del número N de caminantes para la línea semi-infinita con una trampa imperfecta en el origen. Las líneas de puntos son solo una guía para el ojo.

el acople de ciertas proteínas a sitios específicos de ADN para realizar transcripciones, tal es el caso de las proteínas que poseen la habilidad de difundir en una dimensión a lo largo de la hélice de ADN además de la difusión que pueden realizar en la solución [3]. La *intermitencia* inclusive puede ser asociada a problemas de atrapamiento dinámico [64]. Las estrategias de búsqueda, como las llevadas a cabo por depredadores en la búsqueda de presas, o incluso en actividades humanas tales como la localización de víctimas, también se encuentran entre los ejemplos más representativos (a escala macroscópica) del *movimiento intermitente* (ver ref. [48]).

Una aplicación importante del presente formalismo es la relacionada con el *target problem*, es decir, con la búsqueda de *un blanco* estático por un *conjunto de buscadores* que alternan entre dos estados de movimiento [30, 48]. A modo de ejemplo calculamos el MTL para un blanco, en el caso de atrapamiento perfecto, ubicado en el origen de una cadena infinita. Supondremos que cada caminante puede estar en cualquiera de dos posibles estados de propagación. Uno de los estados involucra una caminata aleatoria simétrica a primeros vecinos con un tiempo medio de salto $1/\lambda$. En el otro estado los buscadores realizan una caminata aleatoria simétrica con un tiempo medio de salto $1/\lambda$, pero en este caso los saltos se realizan a segundos vecinos. En el segundo estado la ‘difusión’ es dos veces mayor que la del primero pero el buscador puede ‘saltarse’ el blanco y, por lo tanto, no capturarlo. Las transiciones entre el primer y el segundo estado interno se realizan con una tasa constante γ_1 , mientras que la situación inversa (transiciones del

segundo al primer estado) se realizan con una tasa γ_2 .

El conjunto de ecuaciones maestras acopladas que describen el proceso de transporte intermitente para cada caminante es:

$$\frac{\partial P_1(j, t)}{\partial t} = \frac{\lambda}{2} (P_1(j + 1, t) + P_1(j - 1, t)) - \lambda P_1(j, t) + \gamma_2 P_2(j, t) - \gamma_1 P_1(j, t), \quad (5.45)$$

$$\frac{\partial P_2(j, t)}{\partial t} = \frac{\lambda}{2} (P_2(j + 2, t) + P_2(j - 2, t)) - \lambda P_2(j, t) + \gamma_1 P_1(j, t) - \gamma_2 P_2(j, t), \quad (5.46)$$

donde $P_1(j, t)$ ($P_2(j, t)$) es la probabilidad conjunta de que el caminante este en el sitio j , en el estado interno 1 (2) al tiempo t . Para una distribución inicial uniforme de caminantes (en el límite termodinámico - sección 5.5.2), podemos utilizar las ecuaciones (5.36) y (5.37), con $P(j = 0, u) \equiv P_1(j = 0, u) + P_2(j = 0, u)$ y evaluar T_ρ como función de γ_1 y γ_2 .

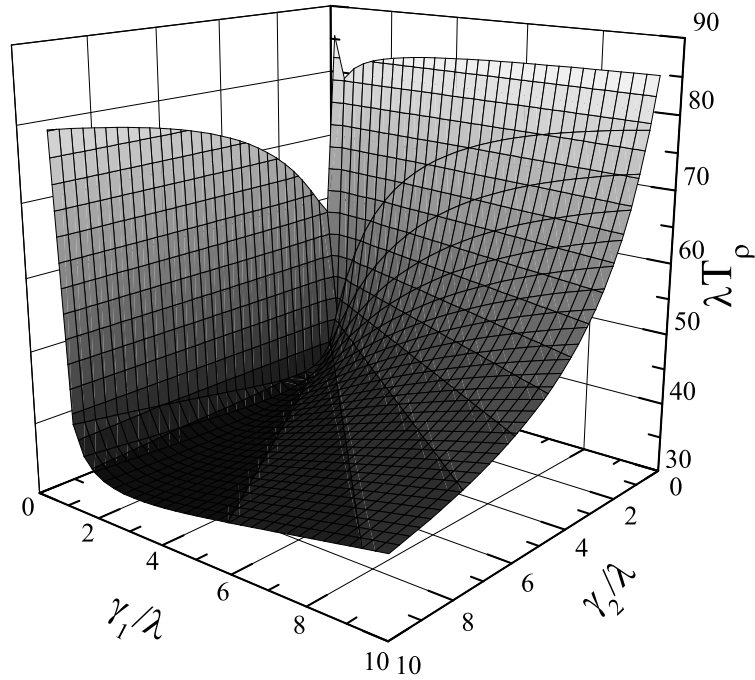


Figura 5.5: T_ρ en el límite termodinámico, para una concentración $\rho = 0.1$ de caminantes, como función de los parámetros γ_1 y γ_2 .

En la Fig. 5.5 mostramos el comportamiento del MTL como función de los parámetros de transición γ_1 y γ_2 . Identificamos en el gráfico una región de valores ‘óptimos’ (minimización del tiempo de búsqueda) siguiendo la escala de grises, un tono más oscuro denota un valor más pequeño en $T_\rho(\gamma_1, \gamma_2)$. El comportamiento de la superficie $T_\rho(\gamma_1, \gamma_2)$ indica que es posible adecuar los parámetros γ_1 y γ_2 para optimizar la búsqueda. Observamos

que el MTL caracteriza en forma adecuada la mejora provista por la *estrategia de búsqueda intermitente* [48]; un comportamiento similar fue encontrado en la Ref. [39] (aunque en un marco de aplicación diferente).

5.8. Conclusiones del capítulo

En este capítulo presentamos un formalismo unificado y general para la *'estadística del tiempo de vida* de un blanco estático en presencia de un conjunto de buscadores independientes que difunden en el espacio. El esquema propuesto permite tratar el transporte en los casos de difusión normal y anómala, tanto en redes como en el espacio continuo, atrapamiento perfecto e imperfecto y puede ser extendido en forma directa al caso de blancos dinámicos o fluctuantes. Introducimos el *tiempo medio de vida del blanco* (MTL) y establecimos las relaciones con otras magnitudes de relevancia para la estadística temporal del atrapamiento. Particularmente discutimos el rol desempeñado por la distribución inicial de caminantes.

Para los problemas de atrapamiento con un único blanco el MFPT (*tiempo medio para el primer pasaje*) es de aplicación limitada si el proceso es *'transitorio'* (ec. (5.5)), puesto que el MFPT diverge. Para una red $1D$ el MTL se torna finito al incrementar el número de caminantes, pero esto no es posible (diverge para cualquier número de caminantes) si $d > 1$. Sin embargo en el límite termodinámico, el MTL es finito para todas las situaciones consideradas.

Esta propiedad es de sumo interés, puesto que pone de manifiesto que el MTL es la magnitud física adecuada para las situaciones en las cuales existe un gran número de buscadores (límite termodinámico) y un único blanco o centro de captura.

Un comportamiento novedoso del MTL es que no presenta una ley de escala universal como función del número o densidad de caminantes. Finalmente, el MTL demostró ser una herramienta eficiente para la caracterización de las *estrategias de búsquedas intermitentes* puesto que posee una dependencia explícita con los parámetros que regulan la intermitencia, permitiendo ajustar los mismos de tal forma de minimizar el tiempo de búsqueda.

Capítulo 6

Búsqueda intermitente de un blanco dinámico

6.1. Introducción

El presente capítulo tiene como objetivo completar y extender resultados obtenidos en capítulos anteriores- 2, 3, 4- ([48, 50, 49]) en los que se presentó un modelo estocástico para la cinética de búsqueda de un blanco fijo. Se ha supuesto que cada caminante/busador alterna entre dos estados de movimiento, ambos de carácter difusivo. Demostramos que la *estrategia intermitente de búsqueda* **siempre** mejora la detección del blanco comparada con la búsqueda en un *único* estado. Un aspecto importante que se introdujo en la dinámica de búsqueda (y que ha sido estudiado recientemente [50, 62]) es considerar, además de los diferentes estados de movimiento, la inclusión de ‘ciertas’ habilidades del buscador o el blanco. Por ejemplo, en los trabajos [62, 50], la ‘agudeza’ visual (del blanco y los buscadores) y la capacidad ‘olfativa’ (del buscador) fueron consideradas como capacidades adicionales.

Con el fin de construir un modelo más representativo de situaciones reales de búsqueda agregamos un aspecto relevante en la detección: la inclusión de una dinámica (o comportamiento fluctuante) del blanco. Estas fluctuaciones, que ocasionan que el encuentro buscador - blanco no resulte necesariamente en captura, pueden deberse a mecanismos internos propios de alguno de ellos o ser el resultado de interacciones con un entorno dinámico. Citemos como ejemplo, en el contexto de reacciones químicas, la activación o desactivación de un reactivo causada por factores externos (fotones, solventes, etc) [88]. En el marco de procesos biológicos el comportamiento dinámico/fluctuante del blanco es un factor determinante en diversos procesos. Por ejemplo, las reacciones que ocurren en el interior de ciertas biomembranas requieren configuraciones geométricas particulares en la estructura de las biomoléculas para que aquellas puedan completarse. La ausencia de estas configuraciones inhiben la reacción, mientras que cambios estocásticos en la geometría de la molécula pueden permitir que la reacción se lleve a cabo. Finalmente mencionemos el

caso de ‘reparto’ de drogas en los tratamientos médicos que generalmente involucra el bloqueo de un grupo de reacciones químicas con el fin de mejorar la efectividad de la medicina distribuida [26].

En un trabajo previo (referencia [64]) se introduce una generalización al problema del atrapamiento permitiendo que encuentros entre ‘partículas’ (buscadores, moléculas, etc.) de dos tipos A y B , sean exitosos dependiendo del estado interno de la partícula A . Dicha partícula, que identificamos como el blanco en este capítulo, posee dos estados: uno *activo* en el cual la captura puede ser llevada a cabo, y uno *inactivo* que imposibilita el atrapamiento. Las ‘partículas’ B son nuestros caminantes/buscadores.

En este capítulo formulamos, en un marco unificado, la *estrategia de búsqueda intermitente* de los buscadores conjuntamente con el comportamiento fluctuante del blanco objeto de búsqueda. Mediante el uso de las *caminatas aleatorias de tiempo continuo* (CTRW) y de la teoría de *Transporte multiestado* [56] calculamos la *probabilidad de supervivencia* (SP) y el *tiempo medio de vida del blanco* (MTL). Establecemos, además, la conexión entre estas magnitudes y el *tiempo del primer pasaje* (FPT) correspondiente al problema de un solo buscador.

El resumen de este capítulo es el siguiente: en la próxima sección (6.2) presentamos el modelo de *búsqueda intermitente de un blanco dinámico* y las definiciones y conceptos básicos a utilizar. Incluidos en la sección 6.3, brindamos la solución analítica obtenida y consideramos el esquema de *alta tasa de transiciones del blanco*. En la sección 6.4 presentamos las ilustraciones correspondientes a los principales resultados obtenidos para la SP y el MTL. Comparamos nuestros resultados analíticos y su evaluación numérica con simulaciones tipo Monte Carlo. Finalmente, en la sección 6.5 discutimos las conclusiones del presente capítulo.

6.2. Enfoque Analítico

6.2.1. El Modelo: Búsqueda Intermitente de un Blanco Dinámico

Consideramos que los caminantes realizan su búsqueda en una cadena (red unidimensional) finita o infinita. Suponemos que el blanco dinámico/fluctuante se mantiene fijo en el origen de la cadena y que, al tiempo $t = 0$, un conjunto de buscadores, distribuidos en forma uniforme a lo largo de la cadena, comienza la “búsqueda”.

En el sitio donde está ubicado el blanco pueden ocurrir las siguientes situaciones:

- El blanco está en un estado *activo*, por lo que el primer caminante que arribe al sitio lo captura con probabilidad 1 (atrapamiento perfecto).
- El blanco está en un estado *pasivo* y permanece en ese estado hasta que el caminante lo abandona. En este caso el blanco se comporta como un sitio ordinario de la cadena y la captura no se puede llevar a cabo.

6.2. ENFOQUE ANALÍTICO

- El blanco está en un estado *pasivo*, pero cambia su estado a *activo* antes de que el buscador abandone este sitio. En esta situación la captura se lleva a cabo.

Denotaremos a los estados internos del blanco por $i = 1$ (estado activo) e $i = 2$ (estado pasivo). Resaltamos que, dada la forma en que definimos estos estados, este modelo es equivalente al de una trampa dinámica. Por este motivo no distinguiremos entre trampa dinámica y blanco intermitente.

Supondremos además que cada buscador puede realizar dos tipos de movimiento en la cadena:

- *Exploración o búsqueda minuciosa*: Random Walk simétrico con saltos a primeros vecinos y probabilidad de transición λ .
- *Relocalización*: Random Walk simétrico con saltos a segundos vecinos y probabilidad de transición λ ,

y que la dinámica de estos caminantes es independiente del proceso dinámico (fluctuaciones) del blanco.

El proceso de búsqueda intermitente de un blanco fluctuante (trampa dinámica) puede describirse, en el caso general de una red, mediante el siguiente conjunto de ecuaciones maestras acopladas,

$$\frac{\partial P_{1,i_0}(\vec{s}, t | \vec{s}_0, 0)}{\partial t} = \mathbb{A}P_{1,i_0}(\vec{s}, t | \vec{s}_0, 0) + \gamma_2 P_{2,i_0}(\vec{s}, t | \vec{s}_0, 0) - \gamma_1 P_{1,i_0}(\vec{s}, t | \vec{s}_0, 0), \quad (6.1)$$

$$\frac{\partial P_{2,i_0}(\vec{s}, t | \vec{s}_0, 0)}{\partial t} = \mathbb{A}P_{2,i_0}(\vec{s}, t | \vec{s}_0, 0) + \gamma_1 P_{1,i_0}(\vec{s}, t | \vec{s}_0, 0) - \gamma_2 P_{2,i_0}(\vec{s}, t | \vec{s}_0, 0), \quad (6.2)$$

donde $P_{i,i_0}(\vec{s}, t | \vec{s}_0, t = 0)$ es la probabilidad condicional de que un caminante este en el sitio \vec{s} con el blanco en el estado i al tiempo t , dado que estuvo en el sitio \vec{s}_0 con el blanco en el estado i_0 al tiempo $t = 0$. Por simplicidad hemos restringido el proceso de *activación* - *desactivación* del blanco a dinámicas de “primer orden” con parámetros γ_i , donde $\gamma_i dt$ es la probabilidad de que ocurra una transición en el intervalo de tiempo dt , desde el estado i hacia el otro estado.

La evolución dinámica de los buscadores, incluyendo la intermitencia entre sus dos estados de movimiento, es descrita a través del operador \mathbb{A} definido en el caso de una cadena como:

$$[\mathbb{A}]_{s,s'} = \frac{\lambda}{2} [(1 - \alpha)(\delta_{s,s'-1} + \delta_{s,s'+1}) + \alpha(\delta_{s,s'-2} + \delta_{s,s'+2}) - 2\delta_{s,s'}], \quad (6.3)$$

donde α es el parámetro que regula la intermitencia del buscador y λ es su constante de difusión. (Figura 6.1).

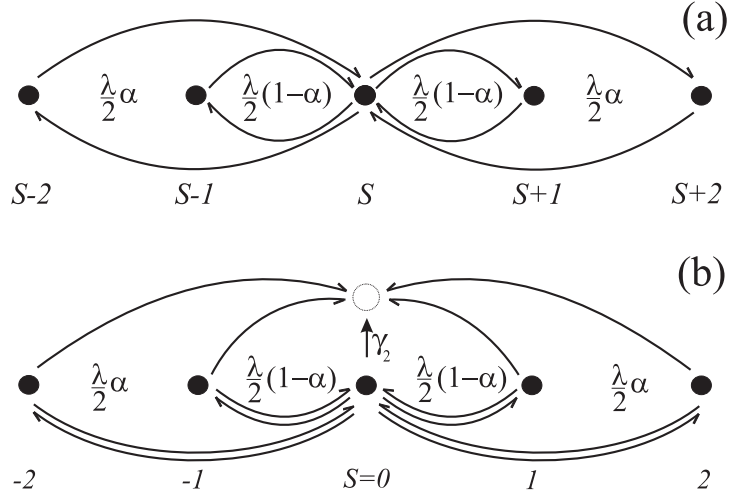


Figura 6.1: **(a)** Esquema de transiciones del caminante desde/hacia el sitio s (lejos del blanco: $s \neq -1, 0, 1$) y **(b)** Transiciones del caminante desde/hacia $s = 0$ (blanco). Un caminante en el sitio 0 puede capturar el blanco si este se activa (con una tasa γ_2) antes de su partida de ese sitio. La dinámica del blanco/trampa es independiente de la dinámica del caminante.

6.2.2. El Proceso de Atrapamiento

Analizaremos el proceso de atrapamiento mediante la SP del blanco (la probabilidad de que el blanco permanezca sin ser detectado hasta el tiempo t) y de una magnitud estrechamente relacionada con ella, el MTL [51] (que computa el tiempo medio para que el primer caminante llegue al blanco en las condiciones apropiadas de captura).

Definimos $F_{1,i_0}(\vec{0}, t | \vec{s}_0, 0)$ como la probabilidad de que el caminante alcance el sitio $\vec{0}$ por primera vez al tiempo t cuando la captura puede efectivizarse (notar los subíndices en la definición de F), dado que el caminante estuvo en el sitio \vec{s}_0 , con el blanco en el estado i_0 al tiempo $t = 0$. $F_{1,i_0}(\vec{0}, t | \vec{s}_0, 0)$, es llamada *densidad de tiempos para el primer pasaje* (First Passage time -FPT- density). Siguiendo los lineamientos de la Ref. [26], introducimos la noción de *estados generalizados*, que tienen en cuenta la posición del caminante y el estado del blanco, (\vec{s}, i) . La conexión entre la FPTD en el estado generalizado $(\vec{0}, 1)$ al tiempo t desde (\vec{s}_0, i_0) (en $t = 0$), $F_{1,i_0}(\vec{0}, t | \vec{s}_0, 0)$, y la probabilidad condicional $P_{i,i_0}(\vec{s}, t | \vec{s}_0, 0)$ viene dada por la ecuación,

$$\hat{F}_{1,i_0}(\vec{0}, u | \vec{s}_0, 0) = \frac{\hat{P}_{1,i_0}(\vec{0}, u | \vec{s}_0, 0)}{\hat{P}_{1,1}(\vec{0}, u | \vec{0}, 0)}, \quad (6.4)$$

la cual es la conocida formula de Siegert [65], generalizada a estados internos [66].

La transformada de Laplace de una función de t se denota por la misma función con un acento circunflejo sobre ella y reemplazando el argumento t por u . Por ejemplo,

$$\hat{P}_{i,i_0}(\vec{s}, u | \vec{s}_0, 0) = \mathcal{L}\{P_{i,i_0}(\vec{s}, t | \vec{s}_0, 0)\} = \int_0^\infty e^{-ut} P_{i,i_0}(\vec{s}, t | \vec{s}_0, 0) dt.$$

Cuando el atrapamiento ocurre en forma independiente del estado *inicial* del blanco, la SP -en presencia de un solo buscador- puede ser escrita (si $\vec{s}_0 \neq \vec{0}$) como,

$$\Phi_1(\vec{0}, t | \vec{s}_0, 0) = 1 - \sum_{i_0=1}^2 \theta_{i_0} \int_0^t F_{1,i_0}(\vec{0}, \tau | \vec{s}_0, 0) d\tau. \quad (6.5)$$

donde θ_{i_0} es la probabilidad del estado inicial del blanco.

La SP al tiempo t ($\Phi_N(t)$) del blanco dinámico en presencia de N buscadores independientes, con distribución inicial uniforme y que difunden en una cadena de M sitios, puede ser escrita en términos de la SP de un solo buscador, $\Phi_1(\vec{0}, t | \vec{s}_0, 0)$ como [51]

$$\Phi_N(t) = \left(1 - \frac{1}{M-1} \sum_{\vec{s}_0 \neq \vec{0}} (1 - \Phi_1(\vec{0}, t | \vec{s}_0, 0)) \right)^N. \quad (6.6)$$

La distribución inicial uniforme de caminantes implica una probabilidad de ocupación $(M-1)^{-1}$ para todos los sitio de la cadena, salvo la posición del blanco cuya probabilidad es nula.

En el límite termodinámico, $N \rightarrow \infty$, $M \rightarrow \infty$, con $N/M \rightarrow \rho$ (concentración de caminantes) obtenemos,

$$\Phi_\rho(t) = \exp \left(-\rho \sum_{\vec{s}_0 \neq \vec{0}} (1 - \Phi_1(\vec{0}, t | \vec{s}_0, 0)) \right). \quad (6.7)$$

El MTL es definido para dominios finitos como [51]

$$T_N = \int_0^\infty \Phi_N(t) dt, \quad (6.8)$$

y en el *límite termodinámico* como

$$T_\rho = \int_0^\infty \Phi_\rho(t) dt. \quad (6.9)$$

6.3. Resultados Analíticos

En esta sección se presenta detalladamente el cálculo de la probabilidad $P_{i,i_0}(s, t | s_0, t = 0)$, en términos de la cual se construyen la SP y el MTL, para el caso de una cadena infinita y el de una finita de M sitios. Dado que el cálculo se limitara a una cadena (red $1D$), abandonamos la notación vectorial.

6.3.1. Cadena homogénea infinita

Siguiendo los lineamientos de las Refs. [56, 57, 73] puede hallarse la solución de la ec. (6.1) utilizando el operador de evolución \mathbb{A} dado por la ec. (6.3). La utilización del formalismo indicado permite obtener expresiones analíticas, en el espacio de Fourier-Laplace, para las probabilidades $P_{i,i_0}(s, t|s_0, t = 0)$ en el caso de una cadena infinita. Para $i = 1$ (estado activo del blanco) tenemos:

$$\begin{aligned}\hat{P}_{1,1}(k, u) &= \frac{1}{\Gamma}(\gamma_2\hat{P}^0(k, u) + \gamma_1\hat{P}^0(k, u + \Gamma)), \\ \hat{P}_{1,2}(k, u) &= \frac{1}{\Gamma}(\gamma_2\hat{P}^0(k, u) - \gamma_2\hat{P}^0(k, u + \Gamma)),\end{aligned}\quad (6.10)$$

donde $\Gamma = \gamma_1 + \gamma_2$ y $P^0(k, u) = 1/(u - \mathbb{A}(k))$, es la transformada de Fourier-Laplace de la probabilidad condicional $P^0(s, t|s_0, t = 0)$ de estar en el sitio s al tiempo t , dado que estuvo en el sitio s_0 al tiempo $t = 0$ correspondiente a un caminante sin la presencia de la trampa dinámica. $\mathbb{A}(k) = \lambda[(1 - \alpha)\cos k + \alpha\cos 2k - 1]$ es la transformada de Fourier del operador de evolución \mathbb{A} definido en (6.3).

Cuando la captura se lleva a cabo independientemente del estado *inicial* del blanco, es necesario evaluar el siguiente promedio:

$$\begin{aligned}\sum_{i_0} \hat{P}_{1,i_0}(k, u) \theta_{i_0} &= \hat{P}_{1,1}(k, u) \theta_1 + \hat{P}_{1,2}(k, u) \theta_2 \\ &= \frac{1}{\Gamma} \left(\gamma_2\hat{P}^0(k, u) + (\gamma_1\theta_1 - \gamma_2\theta_2)\hat{P}^0(k, u + \Gamma) \right),\end{aligned}\quad (6.11)$$

donde θ_1 es la probabilidad que el blanco este inicialmente activo y θ_2 este inactivo con $\theta_1 + \theta_2 = 1$. Eligiendo las condiciones iniciales del blanco como las de equilibrio (proceso “on going”), dadas por [26], $\theta_1 = \gamma_2(\gamma_1 + \gamma_2)^{-1}$, $\theta_2 = \gamma_1(\gamma_1 + \gamma_2)^{-1}$, obtenemos la antitransformada de Fourier de la ec. (6.11) en forma exacta:

$$\sum_{i_0} \hat{P}_{1,i_0}(s, u|s_0, 0) \theta_{i_0} = G \left(\frac{\eta_1^{|s-s_0|}}{\sqrt{x_1^2 - 1}} + \frac{\eta_2^{|s-s_0|}}{\sqrt{x_2^2 - 1}} \right), \quad (6.12)$$

donde $\eta_1 = x_1 - \sqrt{x_1^2 - 1}$, $\eta_2 = x_2 + \sqrt{x_2^2 - 1}$, $G = \gamma_2/2\lambda\Gamma\alpha(x_1 - x_2)$ y

$$x_{1,2} = -\frac{1 - \alpha}{4\alpha} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{1 - \alpha}{2\alpha}\right)^2 + 2\frac{u + \lambda(1 + \alpha)}{\lambda\alpha}}.$$

Promediando la Ec. (6.12) sobre las posiciones iniciales del caminante (distribución uniforme) obtenemos,

$$\sum_{\substack{i_0=1,2 \\ s_0 \neq 0}} \hat{P}_{1,i_0}(s, u|s_0, 0) \theta_{i_0} = \frac{G}{\sqrt{x_1^2 - 1}} \frac{2\eta_1}{1 - \eta_1} + \frac{G}{\sqrt{x_2^2 - 1}} \frac{2\eta_2}{1 - \eta_2}. \quad (6.13)$$

Finalmente, tomando $s = 0$, $s_0 = 0$, obtenemos:

$$\begin{aligned} \sum_{s_0 \neq 0} \mathcal{L} \{(1 - \Phi_1(0, t|s_0, 0))\} &= \frac{1}{u} \sum_{\substack{i_0=1,2 \\ s_0 \neq 0}} \hat{F}_{1,i_0}(0, u|s_0, 0) \theta_{i_0} \\ &= \frac{1}{u} \frac{1}{\hat{P}_{1,1}(0, u|0, 0)} \sum_{\substack{i_0=1,2 \\ s_0 \neq 0}} \hat{P}_{1,i_0}(0, u|s_0, t=0) \theta_{i_0}. \end{aligned} \quad (6.14)$$

La ecuación (6.14) es uno de los resultados principales del presente capítulo y permite calcular la SP, a partir de la ecuación (6.7), y MTL de la ec. (6.9). La inversión analítica de la transformada de Laplace de estas expresiones requiere un procedimiento numérico [60] que será presentado en la sección 6.4.

6.3.2. Anillo de M sitios

Para una cadena de M sitios con condiciones periódicas de contorno (anillo - *ring*), las correspondientes probabilidades condicionales pueden obtenerse a partir de los resultados de la sección anterior en la forma [89]:

$$\hat{P}_{i,i_0}^M(s, u|s_0, t=0) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \hat{P}_{i,i_0}(s + lM, u|s_0, t=0). \quad (6.15)$$

La suma en la Ec. (6.15) puede evaluarse teniendo en cuenta que para todo $l \neq 0$, $|l| M > (s - s_0)$ y en el caso que $l < 0$ $|(s - s_0) + lM| = -(s - s_0) - lM$. Obtenemos así que, por ejemplo:

$$\begin{aligned} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \eta_1^{|s-s_0+lM|} &= \eta_1^{|s-s_0|} + \left(\eta_1^{|s-s_0|} + \eta_1^{-|s-s_0|} \right) \sum_{l=1}^{\infty} \eta_1^{lM} \\ &= \frac{1}{1 - \eta_1^M} \left(\eta_1^{|s-s_0|} + \eta_1^{M-|s-s_0|} \right). \end{aligned} \quad (6.16)$$

La expresión final para la Ec. (6.15) resulta:

$$\begin{aligned} \sum_{i_0} \hat{P}_{1,i_0}^M(s, u|s_0, 0) \theta_{i_0} &= \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sum_{i_0} \hat{P}_{1,i_0}(s + lM, u|s_0, 0) \theta_{i_0} \\ &= G \left(\frac{\eta_1^{|s-s_0|} + \eta_1^{M-|s-s_0|}}{\sqrt{x_1^2 - 1}(1 - \eta_1^M)} + \frac{\eta_2^{|s-s_0|} + \eta_2^{M-|s-s_0|}}{\sqrt{x_2^2 - 1}(1 - \eta_2^M)} \right). \end{aligned} \quad (6.17)$$

Para una distribución uniforme de buscadores a lo largo del anillo puede mostrarse que:

$$\sum_{\substack{i_0=1,2 \\ s_0 \neq 0}} \hat{P}_{1,i_0}^M(s, u|s_0, 0) \theta_{i_0} = G \left(\frac{2}{\sqrt{x_1^2 - 1}} \frac{\eta_1 - \eta_1^M}{(1 - \eta_1^M)(1 - \eta_1)} + \frac{2}{\sqrt{x_2^2 - 1}} \frac{\eta_2 - \eta_2^M}{(1 - \eta_2^M)(1 - \eta_2)} \right). \quad (6.18)$$

Evaluando la Ec. (6.17) en $s = 0$, $s_0 = 0$ y considerando (6.18) obtenemos la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \sum_{s_0 \neq 0} \mathcal{L} \{ (1 - \Phi_1(0, t|s_0, 0)) \} &= \frac{1}{u} \sum_{\substack{i_0=1,2 \\ s_0 \neq 0}} \hat{F}_{1,i_0}^M(0, u|s_0, 0) \theta_{i_0} \\ &= \frac{1}{u} \frac{1}{\hat{P}_{1,1}^M(0, u|0, 0)} \sum_{\substack{i_0=1,2 \\ s_0 \neq 0}} \hat{P}_{1,i_0}^M(0, u|s_0, t=0) \theta_{i_0}. \end{aligned} \quad (6.19)$$

A partir de la Ec. (6.19) se obtiene la SP (Ec. 6.6), $\Phi_N(t)$, y el MTL (Ec. 6.8), T_N .

6.3.3. Alta tasa de transiciones en el atrapamiento dinámico

En este apartado consideramos el regimen de *alta tasa de transiciones* del blanco en el atrapamiento dinámico, es decir, el límite $\Gamma \gg \lambda$.

Tomando la transformada de Laplace de la Ec. (6.5) tenemos que:

$$\hat{\Phi}_1(0, u|s_0, 0) = \frac{1}{u} \left(1 - \sum_{i_0} F_{1,i_0}(0, u|s_0, 0) \theta_{i_0} \right). \quad (6.20)$$

Teniendo en cuenta que:

$$\sum_{i_0} \hat{F}_{1,i_0}(0, u|s_0, 0) \theta_{i_0} = \frac{\gamma_2 \hat{P}^0(0, u|s_0, 0)}{\gamma_2 \hat{P}^0(0, u|0, 0) + \gamma_1 \hat{P}^0(0, u + \Gamma|0, 0)}. \quad (6.21)$$

puede mostrarse que, en el límite $\Gamma \gg \lambda$, se cumple:

$$\begin{aligned} \sum_{i_0} \hat{F}_{1,i_0}(0, u|s_0, 0) \theta_{i_0} &\simeq \frac{\gamma_2 \hat{P}^0(0, u|s_0, 0)}{\gamma_2 \hat{P}^0(0, u|0, 0) + \gamma_1/\Gamma} \\ &\simeq \frac{\nu \hat{P}^0(0, u|s_0, 0)}{1 + \nu \hat{P}^0(0, u|0, 0)}, \end{aligned} \quad (6.22)$$

donde $\nu = \Gamma\gamma_2/\gamma_1$. La Ec. (6.22) provee en forma correcta los límites de atrapamiento perfecto ($\gamma_2/\gamma_1 \gg 1$, es decir, $\nu \rightarrow \infty$),

$$\sum_{i_0} \hat{F}_{1,i_0}(0, u|s_0, 0) \theta_{i_0} = \hat{P}^0(0, u|s_0, 0) / \hat{P}^0(0, u|0, 0)$$

y el caso en que no existe trampa ($\gamma_2/\gamma_1 \ll 1$, es decir, $\nu \rightarrow 0$),

$$\sum_{i_0} \hat{F}_{1,i_0}(0, u|s_0, 0) \theta_{i_0} = 0.$$

Utilizando las Ecs. (6.22) y (6.20) finalmente obtenemos,

$$\hat{\Phi}_1(0, u|s_0, 0) \simeq \frac{1}{u} \left(1 - \frac{\nu \hat{P}^0(0, u|s_0, 0)}{1 + \nu \hat{P}^0(0, u|0, 0)} \right). \quad (6.23)$$

Este resultado adopta la forma usual donde el encuentro entre el buscador y el blanco no resulta necesariamente en la captura de este último (atrapamiento imperfecto) [30].

Partiendo de la Ec. (6.23) y utilizando el mismo procedimiento que llevamos a cabo en (6.3.2), la SP (Ec. 6.6), $\Phi_N(t)$, y el MTL (Ec. 6.8), T_N , pueden ser evaluados para el presente regimen.

6.4. Ilustraciones

En esta sección se muestran algunos ejemplos particulares del modelo presentado en los apartados anteriores. El cálculo de la transformada inversa de Laplace fue llevado a cabo numéricamente [60] y se realizaron simulaciones tipo Monte Carlo (MC) para validar los resultados analíticos obtenidos.

Presentamos a continuación un breve resumen de la metodología utilizada en la simulación MC. Los caminantes se distribuyen de forma uniforme (con una probabilidad por sitio, ρ) en una red unidimensional (cadena) en cuyo origen se ubica el blanco. La traslación de los caminantes en presencia del blanco fluctuante (trampa dinámica) se implementa de la siguiente manera: cada caminante tiene asignado un reloj interno (todos comienzan sincronizados en $t = 0$), el cual es actualizado de acuerdo a su distribución de tiempos de pausa (Waiting Time Density-WTD). Para la *activación - desactivación* del blanco se utiliza un procedimiento similar al anterior; el blanco tiene asignado su propio reloj interno el cual se actualiza con WTD exponenciales de parámetros γ_1 y γ_2 . Se define una función indicador que registra la información necesaria: si el blanco fue capturado hasta un cierto tiempo y en el caso en el que fue capturado, el tiempo de este evento. Un caminante elegido al azar realiza el primer paso con probabilidad $(1 - \alpha)$ hacia primeros vecinos o con probabilidad α hacia segundos vecinos. Cualquiera sea la longitud del salto, el mismo se realiza a izquierda o derecha con probabilidad $1/2$. Comprobamos si las condiciones de captura/atrapamiento son cumplidas, si obtenemos una respuesta afirmativa, detenemos la dinámica, actualizamos nuestra función indicador y generamos un nuevo ensamble de caminantes. Si obtenemos una respuesta negativa, continuamos el procedimiento eligiendo (en forma aleatoria) otro caminante. Nuevamente, si ocurre el atrapamiento, actualizamos la función indicador y detenemos la dinámica; si no se produce la captura, la búsqueda continua. La información relevante de cada realización es: si es que fue capturado o no hasta un tiempo predefinido (para la SP), y el tiempo de captura para el Tiempo Medio de Vida del Blanco (MTL).

Se utiliza, tanto para la cadena infinita como para la finita, una concentración de caminantes $\rho = 0.1$ (para la cadena finita definimos la concentración como $\rho = N/M$). El caso finito corresponde a un anillo de $M = 20$ sitios. Todos los tiempos son dados en

términos de la constante de difusión de los caminantes λ . En lo que sigue se consideraran transiciones entre los estados de *activación* - *desactivación* del blanco simétricas, $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma$.

Es importante aclarar que cuando se trata de tasas de transición entre estados del blanco γ_i , estas son *bajas* o *altas* relativas a la constante de difusión λ . Concretamente, tasas bajas significa $\gamma_i < \lambda$ y altas $\gamma_i > \lambda$. Una interpretación equivalente consiste en considerar el tiempo medio de permanencia del blanco en el estado i como γ_i^{-1} ; este será *largo* (*corto*) en la escala de tiempo, λ^{-1} , del propagador \mathbb{A} si $\gamma_i^{-1} > \lambda^{-1}$ ($\gamma_i^{-1} < \lambda^{-1}$).

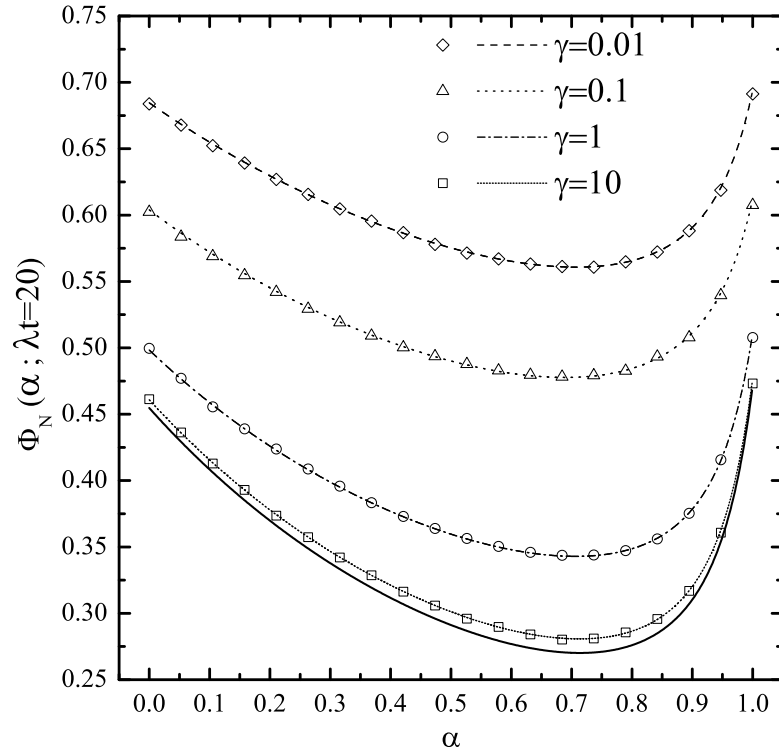


Figura 6.2: Resultados analíticos-numéricos (líneas) y simulaciones Monte Carlo (símbolos) para la SP, $\Phi_N(\alpha; t)$, hasta el tiempo $t = 20$ para diferentes tasas de transición del blanco (γ). (I) (diamantes) $\gamma = 0,01$, (II) (triángulos) $\gamma = 0,1$, (III) (círculos) $\gamma = 1$ y (IV) (cuadrados) $\gamma = 10$. Se ha incluido a modo de comparación el caso de blanco no fluctuante-trampa estática (línea continua gruesa).

En la Fig.6.2 se presentan curvas (para una cadena finita) de la Probabilidad de Supervivencia $\Phi_N(\alpha, t)$ para un tiempo determinado de evolución $t = 20$. Se observa como la *búsqueda intermitente* mejora la probabilidad de detección, es decir, minimiza la SP del blanco comparada con la *búsqueda en un sólo estado* ($\alpha \sim 0$, $\alpha \sim 1$). A modo de comparación también se incluye el caso de “trampa estática” (el blanco está siempre activo). Como puede verse en la figura, existe un valor óptimo de α para cada tasa de transición del blanco, γ . Si bien todas las curvas presentan un comportamiento cualitativamente similar, es evidente que la tasa de transiciones γ juega un rol importante en la optimización.

La razón entre el máximo valor de la SP, que ocurre para $\alpha = 1$, y el correspondiente mínimo es de casi un 80 % (120 %) para $\gamma = 0,1$ ($\gamma = 0,01$). Para valores altos de γ la SP se aproxima al límite de “trampa estática”.

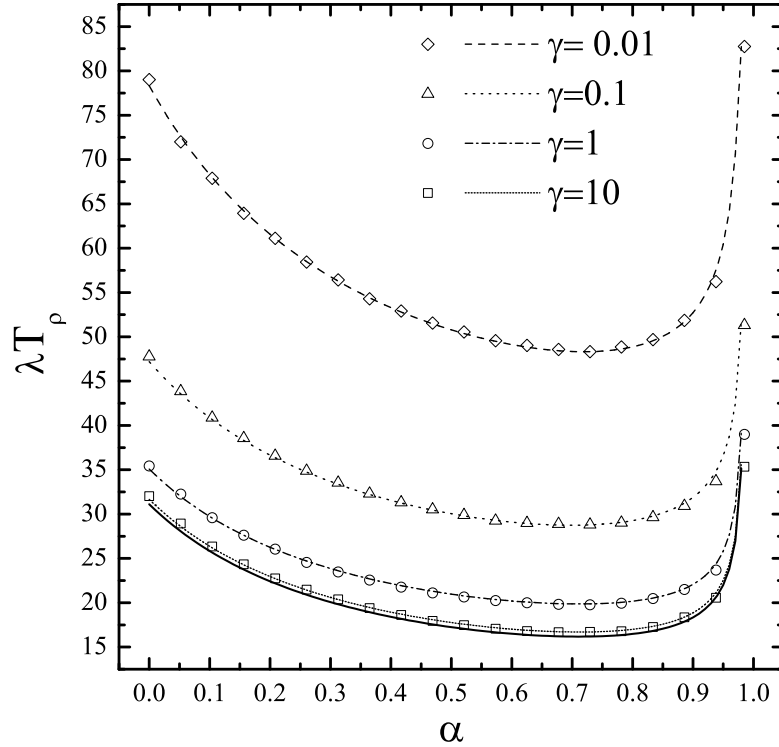


Figura 6.3: Resultados analíticos-numéricos (líneas) y simulaciones Monte Carlo (símbolos) para el Tiempo Medio de Vida del Blanco (MTL) T_ρ , para diferentes tasas de transición del blanco (γ). (I) (diamantes) $\gamma = 0,01$, (II) (triángulos) $\gamma = 0,1$, (III) (círculos) $\gamma = 1$ y (IV) (cuadrados) $\gamma = 10$. Se ha incluido a modo de comparación el caso de trampa estática/blanco no fluctuante (línea continua gruesa).

Las curvas presentadas en la Fig.6.3 corresponden al MTL (en el caso finito) en función del parámetro de intermitencia del buscador α , para diferentes tasas de transición γ del blanco. Se observa la misma tendencia que la SP (figura 6.2) mostrando un aumento notable en el MTL para valores bajos de las tasas de transición, γ , del blanco. Es posible inferir a partir de las curvas, que el blanco con una tasa de transición “modesta” ($\gamma = 0,1$) podría duplicar su “esperanza” de vida, mientras que una alta “actividad” ($\gamma > 1$) lo aproxima al caso estático y, por lo tanto, a una reducción en su “tiempo de vida”. Vale la pena resaltar que, si bien el MTL contiene menos información que la SP, a mostrado ser una herramienta simple y eficiente para la caracterización del esquema de búsqueda propuesto.

La figura 6.4 presenta el comportamiento del MTL, para una tasa de cambio entre estados del blanco fija ($\gamma = 1$), en función del parámetro de intermitencia del caminante α y para diferentes tamaños de la cadena ($M = 20, 40, 60, 100, 200, 1000, \infty$). En todos los

casos la concentración de caminantes es $\rho = 0,1$. Puede apreciarse cómo el sistema finito (anillo) se aproxima a la cadena infinita, incluso para valores de M no demasiado grandes. Se observa que para todos los tamaños del sistema existe un valor mínimo para el MTL, lo que constituye una característica robusta del esquema de búsqueda intermitente.

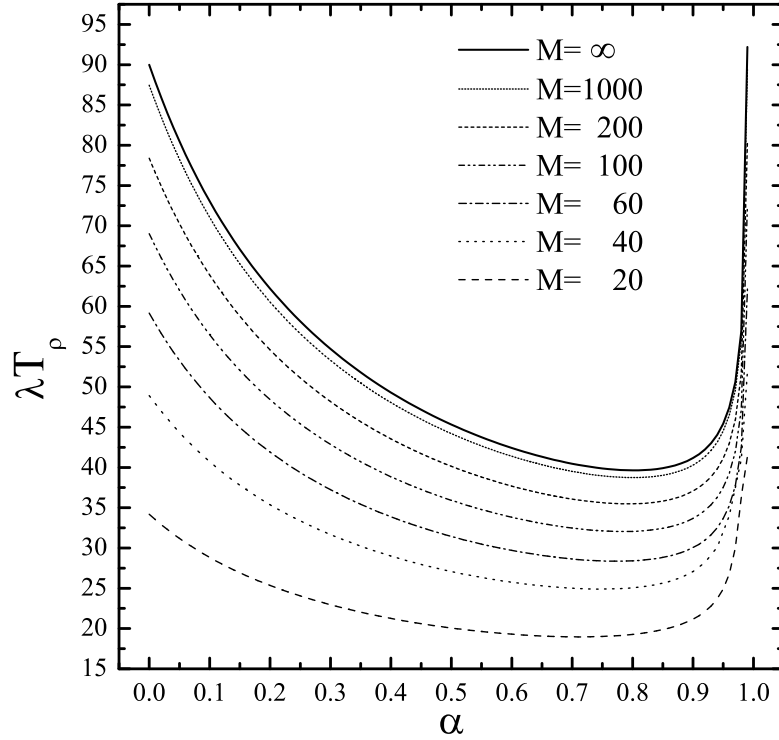


Figura 6.4: Tiempo medio de vida del Blanco (MTL), para una tasa fija de transición del blanco ($\gamma = 1$), como función del parámetro de intermitencia del caminante α y para diferentes tamaños, M , de la cadena. De abajo hacia arriba $M = 20, 40, 60, 100, 200, 1000$ y $M = \infty$ (línea continua gruesa).

En la Fig.6.5 se muestra el comportamiento de la SP ($\Phi_N(\alpha, t)$) en el regimen de *alta tasa de transiciones* del blanco, para un tiempo de evolución fijo $t = 20$. En este regimen, el comportamiento de la SP de un blanco dinámico se aproxima al de una trampa imperfecta (ver 6.3.3), con una medida de la “imperfección” de captura $\nu = (\gamma_1 + \gamma_2)\gamma_2/\gamma_1$. Cuando $\nu \rightarrow 0$ no es posible el atrapamiento -el blanco esta en estado pasivo- y si $\nu \rightarrow \infty$ el atrapamiento es perfecto (el blanco siempre esta activo). Es importante notar como, a partir de valores de γ_i no demasiado grandes, el atrapamiento dinámico se asemeja al caso de una trampa imperfecta.

Resaltamos el excelente acuerdo entre los resultados analíticos-numéricos y las simulaciones de Monte Carlo.

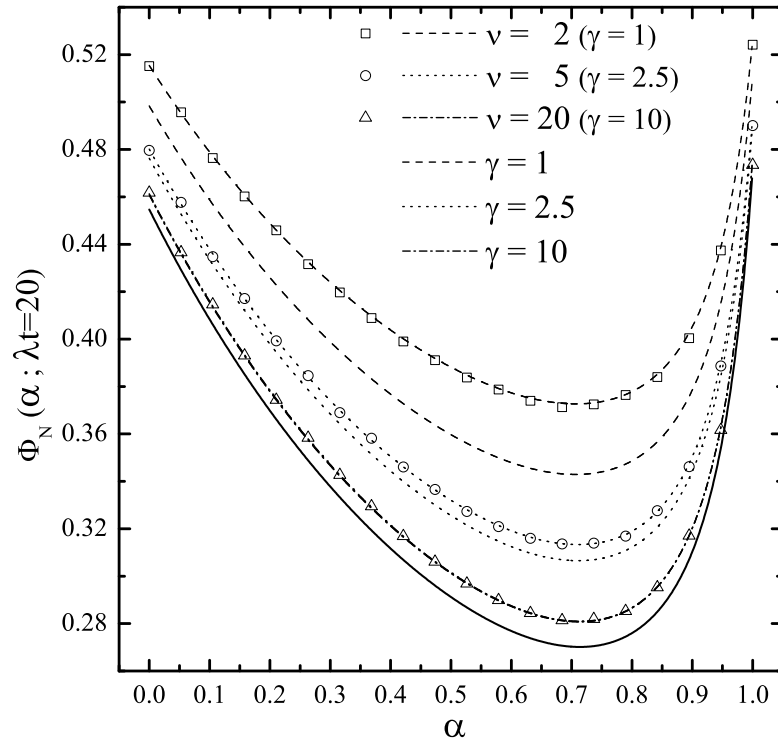


Figura 6.5: Resultados analíticos-numéricos (líneas) y simulaciones Monte Carlo (símbolos) para la SP, $\Phi(\alpha; t)$, hasta el tiempo $t = 20$, en el régimen de alta tasa de transiciones del blanco. Líneas con símbolos corresponden al caso ‘imperfecto’ (*alta tasa de transiciones*) y el mismo tipo de líneas (pero sin símbolos) para el atrapamiento dinámico. De arriba hacia abajo, (I) (cuadrados) $\nu = 2$, $\gamma = 1$; (II) (círculos) $\nu = 5$, $\gamma = 2,5$ y (III) (triángulos) $\nu = 20$, $\gamma = 10$. Se ha incluido a modo de comparación el caso de blanco no fluctuante-trampa estática (línea continua gruesa).

6.5. Conclusiones del capítulo

En este capítulo se presentó un modelo representativo de la cinética de búsqueda de un blanco fluctuante por un conjunto de caminantes que se desplazan en forma intermitente.

El esquema introducido se basó en el formalismo de RW multiestado y los resultados presentados complementan y extienden los obtenidos en capítulos anteriores incluyendo la posibilidad de que un encuentro buscador – blanco no resulte necesariamente en captura de este último. Para modelar este fenómeno se dotó al blanco con la capacidad de “fluctuar” entre dos estados, uno sólo de los cuales permite la captura por algún buscador.

Se evaluaron la Probabilidad de Supervivencia, SP, del blanco (a un tiempo fijo) y el MTL (tiempo medio de vida del blanco), estudiando su dependencia con la probabilidad de transición (γ_i) entre los estados del blanco y con α (parámetro que caracteriza la intermitencia de los buscadores). Encontramos que la SP es una función no monótona de α para un amplio rango de valores de las probabilidades de transición γ_1 y γ_2 , extendiendo

el resultado conocido de que los procesos de búsquedas intermitentes son beneficiosos [41] al caso de un blanco fluctuante.

Se introdujo el MTL (herramienta que fue desarrollada en el Cap. 5), y la forma de obtenerlo en términos de la SP. Análogamente a la SP, el MTL es una función no monótona del parámetro α (que regula la intermitencia de los caminantes) para un amplio rango de valores de las probabilidades de transición γ_i . El MTL mostró adecuadamente la optimización debida a la estrategia de búsqueda intermitente y, pese a poseer menos información que la SP, probó ser una herramienta muy útil para caracterizar la eficiencia de los procesos de búsqueda.

Se ha avanzado de este modo en el estudio de los procesos de búsqueda intermitente incluyendo en su descripción, tanto teórica como a través de simulaciones, el comportamiento dinámico del blanco. Se ha presentado un modelo que captura, en un marco unificado, el comportamiento dinámico del blanco y la búsqueda intermitente llevada a cabo por los buscadores. Creemos que el esquema presentado en este capítulo es, simple como para ser resuelto analíticamente, y lo suficientemente rico como para mostrar la influencia de la dinámica del blanco en el proceso de captura mediante estrategias intermitentes.

Capítulo 7

Procesos de adsorción-desorción en interfaces: un enfoque a través del formalismo de las ecuaciones maestras

7.1. Introducción

Durante el desarrollo del presente trabajo de tesis surgió la posibilidad de analizar procesos que involucran la *intermitencia* en un sentido más amplio que el estudiado en capítulos anteriores y muestra la gran versatilidad de los llamados *Procesos Intermitentes*.

Los *procesos intermitentes*¹ se encuentran presentes en numerosos fenómenos de las más variadas disciplinas. En términos generales, estos procesos implican un agente (partículas, buscador, etc.) y dos o más “fases” entre las que se alterna. El concepto fase debe entenderse en un sentido amplio, ya que dependiendo del contexto, puede tratarse de diferentes formas de propagación, como es el caso de la *búsqueda intermitente* donde las fases de búsqueda activa se alternan con estados de relocalización ([1]); interfaces diferentes, como el caso de un reactivo que difunde libremente en un solvente y, de manera intermitente, se une a la superficie de un cilindro ([2]), etc. También se encuentra este tipo de comportamiento en la unión de una proteína a sitios específicos de el ADN en el fenómeno de regulación de la transcripción ([3, 4, 5]). En disciplinas que estudian las interfaces ([6, 7]), la dinámica de adsorción y desorción de moléculas es de importancia fundamental y se aplica en una serie importante de tecnologías; por ejemplo en la producción de soluciones o fundiciones de macromoléculas sintéticas ([8, 9]), dispersiones coloidales ([10]), y en la fabricación de nanoestructuras mono - y multi - capas ([11, 12]).

Dentro de esta clase general de *procesos intermitentes* encontramos el denominado

¹El tema de esta tesis se enmarca dentro de estos procesos.

narrow escape time problem (NET - problem). Este computa el tiempo necesario para que una partícula (molécula, enzima, etc.) contenida en un dominio finito y cerrado, escape a través de una pequeña abertura. Este fenómeno aparece en problemas de diferentes disciplinas; particularmente el *NET problem* encuentra un lugar prominente y destacado en la biología celular, ya que está relacionado con el tiempo requerido por una partícula (liberada dentro de la célula) para activar un mecanismo determinado en la membrana celular. Por ejemplo, mencionemos el caso de una proteína que ‘busca’ un sitio específico en una cadena de ADN ([3, 4, 5]).

Desde el trabajo seminal de Berg y Purcell ([90]), la investigación en esta área ha experimentado un crecimiento constante en el tiempo y ha motivado una gran cantidad de trabajos ([91, 92, 93, 94, 95, 96, 97, 98, 99, 100, 101, 102]). Recientemente se han presentado diversos enfoques sobre el problema del *NET*; por ejemplo, en la referencia [100] se utilizó una aproximación tipo *campo medio* para calcular el tiempo efectivo de reacción y, en la referencia [101] se utilizó un formalismo tipo *backward equation* para la evaluación de este tiempo. Hasta el presente, el impacto de los parámetros geométricos del sistema confinante y la competencia que se establece en el transporte a lo largo de las diferentes interfaces son temas que permanecen esquivos. Es nuestro interés contribuir a la discusión en esta dirección.

Este capítulo tiene como objetivo presentar un modelo analítico, basado en el formalismo de las ecuaciones maestras, para el llamado *narrow escape time problem*. Introducimos un dominio de confinamiento alternativo al esférico usualmente utilizado y consideramos el proceso difusivo en una red en lugar del espacio continuo. Este sistema nos permite estudiar el impacto de los factores geométricos y la competencia entre los diferentes caminos (de frontera y superficiales). La importancia de los dominio $2D$ para el *NET problem* está bien fundada en la literatura reciente [103].

Utilizamos los conceptos de *tiempo medio del primer pasaje* (MFPT), y establecemos la conexión con el *tiempo del primer pasaje* (FPT) correspondiente al problema de un único caminante. Llevamos a cabo nuestra tarea mediante la teoría de Dyson (apéndice D,[6]).

El resumen del capítulo es el siguiente: en la próxima sección (7.2) presentamos las definiciones y conceptos básicos a utilizar. En la misma sección introducimos el modelo, y comentamos los resultados principales. En la sección 7.3 ilustramos los principales resultados analíticos obtenidos y los comparamos con simulaciones tipo Monte Carlo (MC). En la misma sección también presentamos, mediante simulaciones MC, un esquema que generaliza al considerado analíticamente. Finalmente, en la sección 7.4 discutimos las conclusiones del presente capítulo.

7.2. Enfoque analítico

7.2.1. El Modelo

Para introducir nuestro modelo consideremos primero el problema de un caminante que realiza una caminata aleatoria en una red finita y rectangular de $N \times (M + 1)$ sitios (ver figura 7.1). La superficie esta acotada en la dirección y , en la cual los caminantes pueden moverse desde $y = 0$ hasta $y = M$; en la dirección x consideramos condiciones de contorno periódicas, por lo que x y $x + N$ denotan el mismo lugar del espacio. En el punto $(0, 0)$ se encuentra localizada una trampa perfecta, un caminante que arribe a dicho punto es atrapado con certeza (probabilidad uno). Seguimos la evolución de cada caminante considerando la probabilidad condicional $P(n, m, t | n_0, m_0, t = 0) \equiv P(n, m, t)$, la probabilidad ‘sin restricciones’ de estar en (n, m) (donde (n, m) indica coordenadas discretas del punto del espacio (x, y)) al tiempo t dado que estuvo en (n_0, m_0) en $t = 0$. ‘Sin restricciones’ identifica la situación en la cual no existen ‘trampas’ ni ‘sumideros’ en el sistema. $P(n, m, t)$ satisface la siguiente ecuación maestra:

$$\begin{aligned}
\dot{P}(n, 0, t) &= \gamma P(n, 1, t) - \delta P(n, 0, t) \\
&\quad + \beta(P(n + 1, 0, t) + P(n - 1, 0, t) \\
&\quad - 2P(n, 0, t)); \quad m = 0 \\
\dot{P}(n, 1, t) &= \delta P(n, 0, t) - 4\gamma P(n, 1, t) \\
&\quad + \gamma(P(n + 1, 1, t) + P(n - 1, 1, t) \\
&\quad + P(n, 2, t)); \quad m = 1 \\
\dot{P}(n, m, t) &= \gamma(P(n - 1, m, t) + P(n + 1, m, t) \\
&\quad + P(n, m + 1, t) + P(n, m - 1, t)) \\
&\quad - 4\gamma P(n, m, t); \quad 2 \leq m \leq M - 1 \\
\dot{P}(n, M, t) &= \gamma(P(n - 1, M, t) + P(n + 1, M, t) \\
&\quad + P(n, M - 1, t)) \\
&\quad - 3\gamma P(n, M, t); \quad m = M
\end{aligned} \tag{7.1}$$

donde γ es la probabilidad de transición (por unidad de tiempo) en la superficie en la dirección x e y , β es la probabilidad de transición sobre la línea $m = 0$ en la dirección x , y δ es la probabilidad de desorción desde la línea $m = 0$ hacia la superficie. Estamos interesados en el *tiempo medio del primer pasaje* por el sitio trampa por lo que definimos $F(0, 0, t | n_0, m_0, 0)$ como la *densidad del tiempo del primer pasaje* (FPTD) por el sitio $(0, 0)$ al tiempo t , dado que el caminante estuvo en (n_0, m_0) al tiempo $t = 0$. La conexión entre el FPTD y la probabilidad condicional ‘sin restricciones’ $P(n, m, t | n_0, m_0, t = 0)$ se establece recurriendo al llamado ‘Renewal approach’ [51]. Este enfoque relaciona en el dominio de *Laplace*,

$$\hat{F}(0, 0, u | n_0, m_0, t = 0) = \frac{\hat{P}(0, 0, u | n_0, m_0, t = 0)}{\hat{P}(0, 0, u | 0, 0, t = 0)}, \tag{7.2}$$

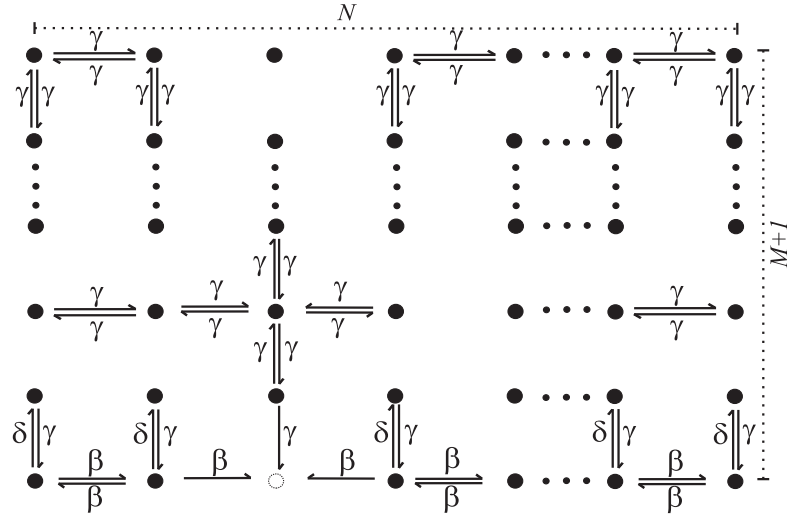


Figura 7.1: Esquema de transiciones del caminante desde/hacia la línea base ($m = 0$) y desde/hacia un sitio genérico en la superficie. Observe que el sitio trampa (círculo vacío) puede ser alcanzado desde la superficie (con tasa de transición γ) y desde la línea base (con tasa de transición β).

la cual es la conocida formula de Siegert ([65]).

Siguiendo los lineamientos de la referencia [51] evaluamos el MFPT por el sitio ‘trampa’ $(0, 0)$ como,

$$\begin{aligned}
 T &= \int_0^\infty t \sum_{n_0, m_0} F(0, 0, t | n_0, m_0, 0) g(n_0, m_0) dt \\
 &= -\frac{\partial}{\partial u} \left\{ \sum_{n_0, m_0} \hat{F}(0, 0, u | n_0, m_0, 0) g(n_0, m_0) \right\} \Big|_{u=0}
 \end{aligned} \tag{7.3}$$

donde $g(n, m)$ denota la densidad de probabilidad de encontrar *inicialmente* al caminante en el sitio (n, m) .

7.2.2. Formalismo matricial y resultados analíticos

Para el cálculo de la probabilidad $P(n, m, t | n_0, m_0, t = 0)$ realizamos la transformada finita de *Fourier* respecto a la variable x y la transformada de Laplace respecto al tiempo

t en la ecuación (7.1), obtenemos:

$$\begin{aligned}
 & m = 0 \\
 & u\hat{P}(k, 0, u) - P(k, 0, t = 0) = \gamma\hat{P}(k, 1, u) \\
 & \quad - (\delta - A_1(k))\hat{P}(k, 0, u) \\
 & m = 1 \\
 & u\hat{P}(k, 1, u) - P(k, 1, t = 0) = \delta\hat{P}(k, 0, u) + \gamma\hat{P}(k, 2, u) \\
 & \quad - (2\gamma - A(k))\hat{P}(k, 1, u) \\
 & 2 \leq m \leq M - 1 \\
 & u\hat{P}(k, m, u) - P(k, m, t = 0) = A(k)\hat{P}(k, m, u) \\
 & \quad + \gamma(\hat{P}(k, m + 1, u) + \hat{P}(k, m - 1, u) \\
 & \quad - 2\hat{P}(k, m, u)) \\
 & m = M \\
 & u\hat{P}(k, M, u) - \hat{P}(k, M, t = 0) = A(k)\hat{P}(k, M, u) + \\
 & \quad \gamma\hat{P}(k, M - 1, u) - \gamma\hat{P}(k, M, u).
 \end{aligned} \tag{7.4}$$

donde hemos definido $A_1(k) = 2\beta(\cos k - 1)$, $A(k) = 2\gamma(\cos k - 1)$, y utilizamos la siguiente definición para la transformada finita de *Fourier*:

$$\mathcal{F}\{P(n, m, t)\} \equiv P(k, m, t) = \sum_{n=0}^{N-1} e^{ikn} P(n, m, t).$$

Utilizando el formalismo matricial, podemos escribir la ecuación (7.4) en la forma,

$$[u\mathbb{I} - \mathbb{H}]\mathbb{P} = \mathbb{I}, \tag{7.5}$$

donde \mathbb{I} es la matriz identidad, \mathbb{H} es una matriz tri-diagonal $(M + 1) \times (M + 1)$ con elementos:

$$\mathbb{H} = \begin{bmatrix} C_1 & \gamma & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \delta & C & \gamma & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \gamma & C & \gamma & 0 & \vdots \\ \dots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \dots & \dots & \dots & \gamma & C & \gamma \\ 0 & \dots & & 0 & \gamma & \gamma + C \end{bmatrix}, \tag{7.6}$$

C y C_1 son definidas como $C = -2\gamma + A(k)$, $C_1 = -\delta + A_1(k)$, y \mathbb{P} es una matriz $(M + 1) \times (M + 1)$ con componentes,

$$\left[\hat{\mathbb{P}}(k, u) \right]_{m, m_0} = \hat{P}(k, m, u | n_0, m_0, t = 0).$$

Con la finalidad de hallar la solución de la ecuación (7.5) descomponemos la matriz \mathbb{H} de la siguiente forma,

$$\mathbb{H} = A(k)\mathbb{I} + \mathbb{H}^0 + \mathbb{H}^1 + \mathbb{H}^2 \tag{7.7}$$

donde

$$\mathbb{H}^0 = \begin{bmatrix} -\gamma & \gamma & 0 & \dots & 0 \\ \gamma & -2\gamma & \gamma & \dots & 0 \\ 0 & \gamma & -2\gamma & \gamma & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \gamma & -2\gamma & \gamma \\ \dots & \dots & 0 & \gamma & -\gamma \end{bmatrix}, \quad (7.8)$$

corresponde a la matriz de transición de una caminata aleatoria simétrica a primeros vecinos en una red finita ($M + 1$ sitios) con condiciones de contorno reflectantes en los extremos. Por otro lado:

$$\mathbb{H}^1 = (\gamma - \delta + A_1(k) - A(k))\delta_{i,0}\delta_{0,j} \quad (7.9)$$

$$\mathbb{H}^2 = -(\gamma - \delta)\delta_{i,1}\delta_{0,j} \quad (7.10)$$

La solución formal de la ecuación (7.5) es:

$$\hat{\mathbb{P}} = [u\mathbb{I} - \mathbb{H}]^{-1}. \quad (7.11)$$

Aplicando el procedimiento de Dyson ([6], apéndice D) podemos deducir una expresión general para $\left[\hat{\mathbb{P}}(k, u)\right]_{m, m_0}$. A partir de esta expresión, derivamos la probabilidad de que el caminante esté en el sitio de superficie (n, m) al tiempo t dado que estuvo en (n_0, m_0) en $t = 0$, $P(n, m, t | n_0, m_0, t = 0)$ utilizando la transformada inversa de *Laplace* en u y la transformada inversa de *Fourier* en k (para la coordenada x) para cada elemento de matriz $\left[\hat{\mathbb{P}}(k, u)\right]_{m, m_0}$. Nuestro interés se concentra en el cálculo de (7.3), por lo que sólo necesitamos evaluar la transformada inversa de *Fourier* en $\hat{P}(0, 0, u | n_0, m_0, t = 0)$ es decir, los elementos $\mathcal{F}^{-1} \left\{ \left[\hat{\mathbb{P}}(k, u)\right]_{0, m_0} \right\}$. En este caso puede mostrarse que,

$$\left[\hat{\mathbb{P}}(k, u)\right]_{0, m_0} = \frac{\eta^{m_0} + \eta^{\tilde{M} - m_0}}{\delta(1 - \eta)(1 - \eta^{\tilde{M} - 1}) + (u - A_1(k))(1 + \eta^{\tilde{M}})}, \quad (7.12)$$

donde $\eta = 1 + (\tilde{u} - \sqrt{\tilde{u}^2 + 4\gamma\tilde{u}}) / 2\gamma$, $\tilde{M} = 2M + 1$ y $\tilde{u} = u - A(k)$. Evaluamos la transformada inversa de *Fourier* en $\left[\hat{\mathbb{P}}(k, u)\right]_{0, m_0}$ de la siguiente forma,

$$\hat{P}(0, 0, u | n_0, m_0, t = 0) = \frac{1}{N} \sum_{q=0}^{N-1} e^{i\frac{2\pi n_0 q}{N}} \left[\hat{\mathbb{P}}\left(\frac{2\pi q}{N}, u\right)\right]_{0, m_0}. \quad (7.13)$$

Utilizando (7.13) en (7.2) obtenemos el MFPT por el sitio ‘blanco’ o ‘trampa’. El punto siguiente consiste en evaluar el MFPT para una dada distribución inicial. Elegimos una distribución inicial uniforme sobre la línea base ($y = 0$), es decir, $g(n, m) = (1 -$

$\delta_{n,0}\delta_{m,0}/(N-1)$ (notar que excluimos en forma explícita la posibilidad de tener un caminante en el sitio $(0,0)$ en $t=0$). Obtenemos finalmente:

$$T = \frac{N}{N-1} \frac{\delta M + \gamma}{\gamma} \sum_{q=1}^{N-1} \left[\hat{\mathbb{P}}\left(\frac{2\pi q}{N}, u=0\right) \right]_{0,0}. \quad (7.14)$$

La ecuación (7.14) constituye uno de los principales resultados. Dado que $\eta^M \simeq 0$ ⁽²⁾, considerando $N/(N-1) \simeq 1$ y llamando $z_q = 1 - \cos \frac{2\pi q}{N}$, podemos expresar la ecuación (7.14) como,

$$T \simeq \frac{\delta M + \gamma}{\gamma} \sum_{q=1}^{N-1} \frac{1}{(2\beta - \delta)z_q + \delta \sqrt{z_q^2 + 2z_q}}. \quad (7.15)$$

Consideremos ahora los regímenes (i) $\delta \ll 2\beta$ (particularmente $\delta \ll \gamma$), (ii) $\delta \approx 2\beta$ y (iii) $\delta \gg 2\beta$ (particularmente $\delta \gg \gamma$). En (i) la suma en el lado derecho de la igualdad toma la forma $\sim \sum z_q^{-1}$. Observamos que la contribución a esta suma proviene del entorno $z_q \sim 0$, es decir, de $1 - \cos \frac{2\pi q}{N} \simeq \frac{1}{2} \left(\frac{2\pi q}{N}\right)^2$, entonces $\sum z_q^{-1} \sim N^2$. Teniendo en cuenta estas consideraciones una primera aproximación resulta $T \sim a_1 \frac{N^2}{2\beta}$, donde a_1 es un parámetro computable. En (ii) y (iii) podemos utilizar un argumento similar. La diferencia en este caso es que $\sim \sum z_q^{-1/2} \sim N$, entonces en (ii) $T \sim a_2(\gamma^{-1}MN + (2\beta)^{-1}N)$ y en (iii) $T \sim a_3\gamma^{-1}MN$. Al igual que antes a_2 y a_3 son parámetros computables. En el siguiente esquema resumimos los tres regímenes,

$$T \sim \begin{cases} (2\beta)^{-1}N^2 & \text{if } \delta \ll 2\beta \\ \gamma^{-1}MN + (2\beta)^{-1}N & \text{if } \delta \approx 2\beta \\ \gamma^{-1}MN & \text{if } \delta \gg 2\beta \end{cases} \quad (7.16)$$

La ecuación (7.16) merece una discusión más elaborada. Diversos resultados de la literatura ([63, 57]) muestran que en sistemas finitos el MFPT se comporta como $\sim L^D$ donde D es la dimensión espacial y L es la longitud característica del sistema. Consideremos primero los regímenes (ii) y (iii). En (ii) cuando $\delta \approx 2\beta$, tenemos un tipo de transporte ‘mezclado’ (camino $1D$ y $2D$). Contribuciones en este regimén provienen de ‘excursiones superficiales’ ($\sim MN$) y ‘camino de borde o frontera’ ($\sim N$). En el regimén $\delta \gg 2\beta$ sin embargo, cualquier camino superficial es preferido a un camino de borde y $T \sim \gamma^{-1}MN$.

El regimén (i) merece una atención especial puesto que en este caso $\delta/\gamma \ll 1$ (es decir, una vez en la línea base el caminante tiene una probabilidad extremadamente baja de volver a la superficie), y teniendo en cuenta la distribución inicial (el caminante empieza su búsqueda en la línea base) uno podría asumir que el MFPT debería escalar como $\sim N$, sin embargo obtenemos $\sim N^2$. Este comportamiento proviene de la distribución inicial elegida; discutimos anteriormente que este regimén es equivalente a un movimiento

²Puesto que $A(k) < 0 \implies \tilde{u} > 0$, podemos escribir $\eta = 1 / \left[\left(1 + \frac{\tilde{u}}{2\gamma}\right) + \sqrt{\left(1 + \frac{\tilde{u}}{2\gamma}\right)^2 - 1} \right]$ de lo cual obtenemos $\eta < 1$. Entonces mientras M crece $\eta^M \rightarrow 0$

unidimensional, entonces aquí ([63]) $T_{n_0} = n_0(N - n_0)/2\beta$, expresión que computa el tiempo de arribo al sitio 0 empezando desde n_0 . Promediando T_{n_0} sobre los sitios iniciales (distribución inicial uniforme) resulta en,

$$T = \sum_{n_0} T_{n_0}/(N - 1) = \frac{1}{6} \frac{(N^3 - N)}{2\beta(N - 1)} \sim N^2/2\beta,$$

lo cual da cuenta del resultado observado.

Las transiciones entre los regímenes pueden ser entendidas estudiando el *tiempo medio de retorno*, una magnitud relacionada al tamaño del sistema en la dirección y y a la probabilidad de desorción. En particular para nuestro sistema evaluamos el *tiempo medio de retorno* ([104]) a la línea base (no necesariamente al sitio blanco/trampa) y obtenemos,

$$T_{ret} = \frac{1}{\delta} + \frac{M}{\gamma} \quad (7.17)$$

T_{ret} representa el tiempo necesario para dejar la línea base ($1/\delta$) y retornar a ella (M/γ). Si tenemos N sitios posibles como destino en la frontera inferior (línea base), esperamos que el *tiempo medio* para ‘alcanzar’ un sitio específico, es decir el MFPT por ese sitio se comporte como $T \sim NT_{ret} = \delta^{-1}N + \gamma^{-1}MN$. Obsérvese que con este argumento informal reobtenemos el MFPT en el regimen (ii) de (7.16). El rol de T_{ret} es resaltado en la siguiente expresión cerrada para la ecuación (7.15) (en el límite $z_q \sim 0$):

$$T \simeq \left[\frac{1}{\delta} + \frac{M}{\gamma} \right] \frac{N}{\pi} \left[\gamma_e + \Psi(N) + \Psi \left(1 + \frac{N\delta}{\pi(2\beta - \delta)} \right) - \Psi \left(N + \frac{N\delta}{\pi(2\beta - \delta)} \right) \right], \quad (7.18)$$

donde $\Psi(z)$ es la función Digamma y γ_e es la constante de Euler ([59]). Podemos observar el *tiempo medio de retorno* en el primer factor en el lado derecho de la ecuación (7.18). Observe la similitud entre las ecuaciones (7.18) y (6) en la referencia [101].

7.3. Ilustraciones

En esta sección ilustramos el marco general introducido en secciones anteriores y comparamos nuestros resultados analíticos con simulaciones tipo Monte Carlo (MC). En las figuras siguientes identificamos los cálculos analíticos mediante líneas y por símbolos a las simulaciones de MC. Medimos los tiempos en unidades de la inversa de la probabilidad de transición superficial ($1/\gamma$).

En la figura 7.2 presentamos curvas correspondientes al MFPT (T) como función de la tasa de desorción δ , con $N = 20$, $M = 10$ (inset: $M = 30$), para diferentes valores de la tasa de transición sobre la ‘línea base’ (frontera inferior), β . Notamos que β influencia fuertemente el regimen $\delta/\gamma \ll 1$. En este caso (y teniendo en cuenta la distribución inicial de caminantes) el ‘transporte’ se realiza por la línea base del dominio confinante, siendo este el comportamiento previsible. Por otro lado, esta influencia es considerablemente

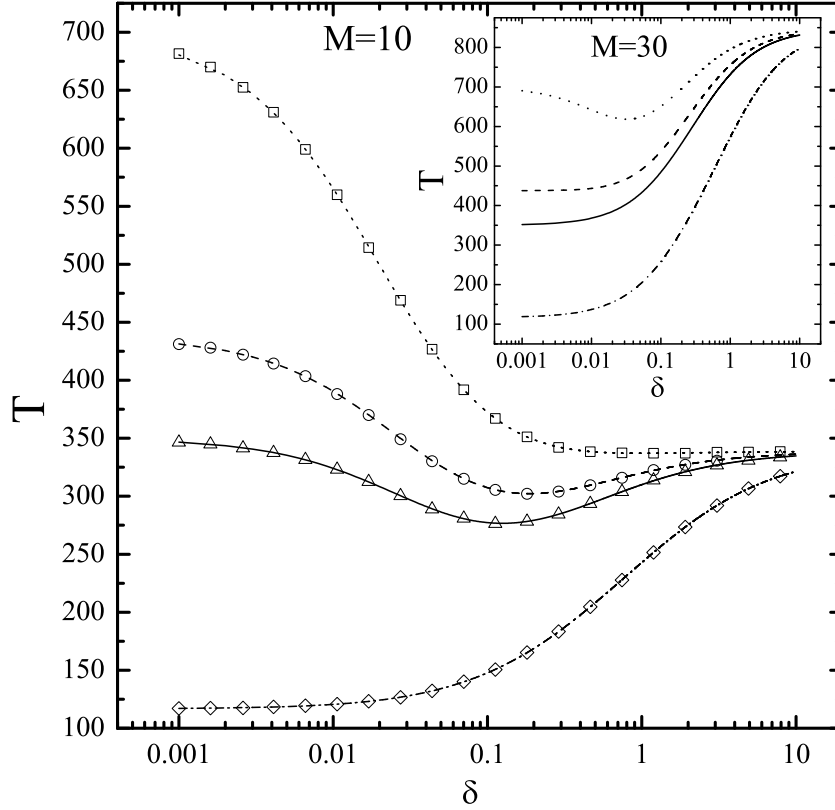


Figura 7.2: MFPT como función de la tasa de desorción (en escala logarítmica) δ , con $M = 10$ (inset: $M = 30$), $N = 20$, para diferentes valores de la tasa de transición (sobre la línea base) β . De abajo hacia arriba $\beta = 0.3, 0.1, 0.08, 0.05$. Las líneas corresponden a resultados analíticos y los símbolos a simulaciones MC.

menor cuando $\delta \gg 2\beta$, ya que en este régimen las ‘excursiones superficiales’ son favorables. Es posible inferir, a partir de lo mostrado en la figura, que la tasa de transición β desempeña un rol importante puesto que parece regular, para valores fijos de N y M , la existencia de un valor óptimo para δ . Vale la pena resaltar que los mismos valores de β que contribuyen a un mínimo en T (en el panel principal), no producen el mismo efecto para valores mayores de M (ver el inset de la figura). Este comportamiento queda bien demostrado en la figura 7.3 y 7.4.

La figura 7.3 presenta curvas correspondientes al MFPT (T) como función de la tasa de desorción δ , con $N = 20$, $\beta = 0.1$, para diferentes tamaños (M) del sistema en la dirección y . Tal cual puede observarse de la figura, M influye en forma significativa el régimen $\delta \gg 2\beta$. Este es un comportamiento esperado, puesto que las excursiones superficiales son favorables, y por lo tanto, más dependientes en el tamaño del sistema en la dirección y . Observamos que en el régimen $\delta \ll 2\beta$ (en particular $\delta \ll \gamma$) todas las curvas se aproximan al mismo valor de T ; los valores de δ en este régimen sumados a la distribución inicial priorizan los ‘caminos’ en la línea base ($m = 0$), volviendo T poco

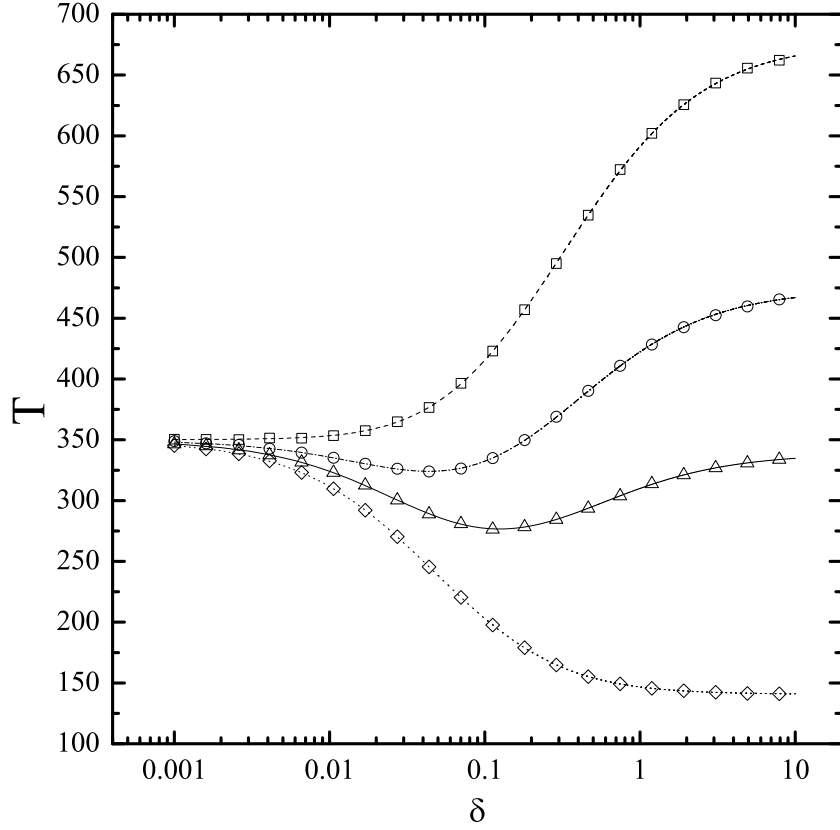


Figura 7.3: MFPT como función de la tasa de desorción (en escala logarítmica) δ , con $\beta = 0.1$, $N = 20$, para diferentes valores de M (tamaño del sistema en la dirección y). De abajo hacia arriba $M = 4, 10, 14, 20$. Curvas continuas (líneas) identifican cálculos analíticos y símbolos identifican simulaciones de Monte Carlo.

sensible a los valores que pueda tomar M .

En la figura 7.4 graficamos el diagrama de fases que resume la *existencia/no-existencia* de ‘transporte óptimo o mejorado’, entendido esto desde la perspectiva de la existencia de un *mínimo* en el MFPT. El diagrama es presentado para un tamaño fijo del sistema en la dirección x , $N = 20$ (inset: $N = 40$) como función de la probabilidad de transición sobre la línea base, β , y el tamaño del sistema (M) en la dirección y . Regiones blancas corresponden a transporte *no-óptimo* (ausencia de mínimo-comportamiento monótono- en el MFPT), mientras que regiones oscuras identifican regímenes de ‘transporte mejorado’ (existencia de mínimo en el MFPT). En la figura 7.4 también incluimos curvas correspondientes al *máximo* M , cuya existencia es una consecuencia de la transición del regimen (i) al regimen (ii), y al *mínimo* de M , causado este por la transición del regimen (ii) al (iii). Estos valores se derivan de la ecuación (7.16),

$$\frac{1}{2\beta} \frac{a_2}{a_3 - a_2} < \frac{M}{\gamma} < \frac{1}{2\beta} \left(\frac{a_1}{a_2} N - 1 \right), \quad (7.19)$$

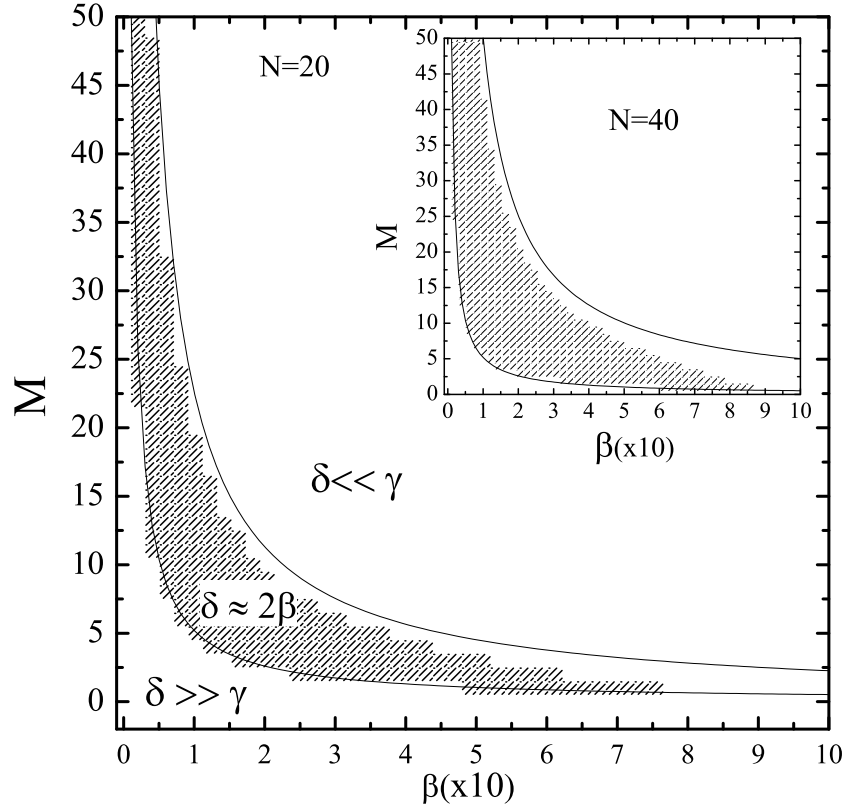


Figura 7.4: Diagrama de fases que resume la *existencia/no-existencia* de ‘transporte óptimo’, para un tamaño fijo del sistema en la dirección x , $N = 20$ (inset: $N = 40$). Las regiones blancas corresponden a transporte *no-óptimo*, mientras que regiones oscuras identifican regímenes de *transporte óptimo o mejorado*. Las curvas continuas corresponden a los valores límites para M determinados por la relación (7.19).

una primera aproximación ($a_1 \approx 0.16$, $a_2 \approx 0.6$, $a_3 \approx 1.18$) de (7.19) es,

$$\frac{N}{2\beta} < \frac{MN}{\gamma} < \frac{N^2}{2\beta}. \quad (7.20)$$

Discutamos más en detalle la transición entre los regímenes. Para hacer más claro el análisis fijamos los valores de β y N . Comenzando en el interior de la región $\delta \ll \gamma$ (este régimen únicamente involucra caminos $1D$ a lo largo de la línea base) y disminuyendo M - δ empieza a crecer- $T \sim N^2/2\beta$ se vuelve similar al tiempo conjunto $NT_{ret} = NM/\gamma + N/\delta$. Esto muestra como se inicia la interacción entre los regímenes (i) y (ii), definiendo entonces un valor *máximo* para M . Para valores de M menores que el *máximo*, un transporte ‘mezclado’ (caminos $1D$ y $2D$ -régimen (ii)) prevalece. Este comportamiento permanece hasta que, $NT_{ret} = NM/\gamma + N/\delta$ se vuelve similar a $T \sim NM/\gamma$, definiendo de esta forma un valor *mínimo* para M (transición desde el régimen (ii) \rightarrow (iii)). En esta nueva situación las excursiones sobre el interior de la superficie dominan, δ crece y se aproxima al límite

$\delta \gg \gamma$. Resaltamos el buen acuerdo entre la region de transporte óptimo, evaluada de la ecuación (7.14), y las cotas correspondientes derivadas de la relación (7.19).

7.3.1. Enfoque MC

En este apartado discutimos brevemente, a través de simulaciones MC, un dominio de confinamiento más *general*. Este dominio se refiere a un sistema en el cual todas las fronteras del sistema tienen como probabilidad de desorción hacia la superficie δ y β es la probabilidad de transición sobre las fronteras o bordes (ver Fig.7.5). Mantenemos a

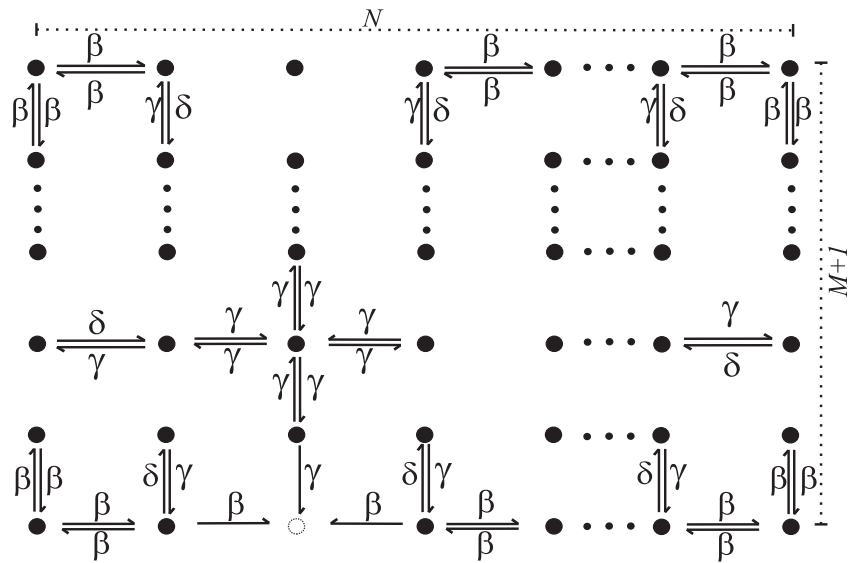


Figura 7.5: Esquema de transiciones del caminante desde/hacia las fronteras del sistema y desde/hacia un sitio genérico en el interior de la superficie. Observe que el ‘sitio trampa’ (círculo vacío) puede ser alcanzado desde la (con una tasa de transición γ) y desde la frontera inferior (con una tasa de transición β).

γ como la probabilidad de transición (por unidad de tiempo) sobre la superficie en las direcciones x e y y utilizamos una distribución inicial uniforme de caminantes sobre las fronteras o contornos del sistema.

Los resultados mostrados en la Fig. 7.6 corresponden al MFPT como función de δ para un tamaño fijo del sistema en la dirección x , $N = 20$. En el panel (a) tenemos $M = 10$ y valores diferentes para la tasa de transición sobre la frontera de la superficie, β y en el panel (b) tenemos $\beta = 2$ y diferentes valores de M (tamaño del sistema en la dirección y). Observamos a partir de la figura que el dominio original propuesto (ver Fig. 7.1) muestra un comportamiento similar al *general* recientemente presentado. Note la correspondencia de los resultados del panel (a) con los de la Fig. 7.2 y aquellos del panel (b) con los de la Fig. 7.3 respectivamente.

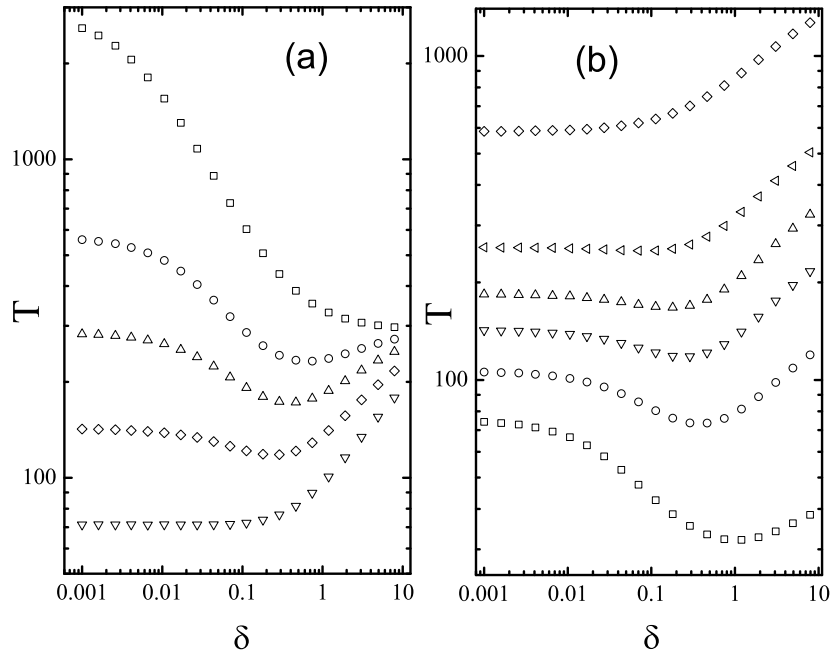


Figura 7.6: (a) MFPT como función de la tasa de desorción δ , con $M = 10$, $N = 20$, para diferentes valores de la tasa de transición (sobre las fronteras) β . De abajo hacia arriba $\beta = 0.1, 0.5, 1, 2, 4$. (b) MFPT como función de δ , con $\beta = 2$, $N = 20$, para diferentes valores de M (tamaño del sistema en la dirección y). De abajo hacia arriba $M = 2, 10, 14, 20, 40$. Todos los resultados corresponden a simulaciones MC.

Se podría cuestionar que a diferencia de la Fig. 7.3, en la Fig. 7.6 (b) todas las curvas tienden a un valor diferente de T (mientras $\delta \rightarrow 0$), sin embargo esto puede ser entendido con relativa facilidad. Para esta situación la distribución inicial es ‘sensible’ al tamaño del sistema en la dirección y , M , ya que $g(n, m) = (1 - \delta_{n,0})\delta_{m,0}/(N - 1) + \delta_{m,M}/N + (\delta_{n,0} + \delta_{n,N-1})/(M - 1)$.

Más allá de la diferencia recién descrita, nuestro modelo (Fig. 7.1) refleja en forma cualitativa el comportamiento de la situación más general (Fig. 7.5), lo cual nos permite extraer información ‘confiable’ de situaciones más generales y complejas a través del análisis de nuestro esquema (más simple) original.

7.4. Conclusiones del capítulo

En este capítulo presentamos un modelo analítico, basado en el formalismo de las ecuaciones maestras, para el llamado *narrow escape time problem*. Introducimos un dominio de confinamiento y consideramos el proceso difusivo en una red. Si bien la elección del dominio puede parecer arbitraria, demostramos que refleja en forma correcta el com-

portamiento de situaciones más generales (sección 7.3.1).

Obtuvimos resultados analíticos para el *tiempo medio del primer pasaje* (MFPT), magnitud básica en el *NET problem*, y estudiamos su dependencia respecto a la probabilidades de: transición sobre la superficie (γ), desorción desde los bordes de la superficie (δ) y transición sobre los bordes de la superficie (β). Analizamos también el efecto en el MFPT de las dimensiones del dominio de confinamiento. En todas las situaciones el acuerdo entre los resultados analíticos y las simulaciones de Monte Carlo resultó satisfactorio.

El esquema presentado en este capítulo es susceptible de ser estudiado en forma analítica y lo suficientemente rico como para mostrar la influencia de los factores geométricos del sistema y la interacción entre las ‘excursiones’ de superficie y los ‘caminos’ en los bordes de la superficie. Creemos haber contribuido a un área de creciente interés dando una ‘visión física’ plausible respecto al mecanismo de difusión mediado por superficie. El modelo presentado captura en un marco unificado los ‘ingredientes’ necesarios para caracterizar el *NET problem*.

Capítulo 8

Conclusiones y Comentarios Finales

Como fue mencionado en la Introducción, el presente trabajo de tesis fue redactado con la intención de que cada capítulo sea autocontenido, incluyendo las discusiones respectivas al tema tratado. Presentamos a continuación un resumen de las conclusiones incluidas en cada capítulo de este trabajo, realizamos los comentarios finales y esbozamos nuestras perspectivas para trabajos futuros.

El tema desarrollado a lo largo de esta tesis se enmarcó dentro de los *procesos intermitentes* y creemos que el trabajo realizado constituye un importante ejemplo de la enorme versatilidad de dichos procesos en los más variados escenarios.

Las tareas realizadas pueden dividirse en dos grupos,

- El estudio de la búsqueda y localización de blancos como un *proceso intermitente*: Capítulos 2, 3, 4, 5 y 6.
- El estudio del fenómeno de adsorción-desorción en interfaces como un *proceso intermitente*: Capítulo 7.

El primer grupo entiende el concepto de **fase** de un *proceso intermitente* como diferentes formas de propagación, y el segundo desde la perspectiva de diferentes regiones de propagación.

8.0.1. La búsqueda como un proceso intermitente

En particular

En esta sección encontramos lo que constituye el núcleo central de la presente tesis; expondremos a continuación los aportes y avances logrados.

La intermitencia entre estados de propagación estuvo basada fundamentalmente en el formalismo de las *Las Caminatas Aleatorias de Tiempo Continuo* **CTRW** y el modelo de

Transporte Multiestado propuesto por Weiss. Estos enfoques nos permitieron introducir la propuesta innovadora de esta tesis: el estudio de *La Optimización de las Estrategias de Búsqueda y su desarrollo en tiempo continuo*.

- El primer logro importante (Cap.2) ha sido la implementación de un modelo sencillo y tratable en forma analítica (en su mayor parte) para la *búsqueda intermitente* de un blanco que permanece fijo en el origen de una cadena. Caracterizamos el esquema *intermitente* –alternancia entre los estados o *fases* de búsqueda– mediante funciones densidad del tipo exponencial (dinámica de primer orden), aunque el enfoque teórico propuesto es general. Para mostrar la optimización en el proceso de búsqueda evaluamos el *número medio de sitios distintos visitados* por el caminante en función de las tasas de transición, cuando la captura se produce en uno o en los dos estados, mostrando que la *probabilidad de supervivencia* del blanco es una función no-monótona y consecuentemente optimizable de los parámetros que regulan la intermitencia. Los resultados obtenidos demuestran que siempre es posible encontrar tasas de transiciones entre estados que optimicen la localización o encuentro y mejoren la detección comparada con la búsqueda monoestado.[48]

- Una primera extensión del modelo (Cap.3) provino de considerar, tanto la influencia del sesgo (anisotropía) en el desplazamiento de ambos estados, como la longitud del desplazamiento en uno de los *estados* de búsqueda (*fase de relocalización*). En esta etapa del trabajo se comenzaron a implementar simulaciones tipo Monte Carlo, logrando un muy buen acuerdo entre los resultados analíticos y estas simulaciones. Se obtuvieron fenomenologías muy ricas para la probabilidad de supervivencia del blanco, pasando de un mínimo absoluto a un comportamiento monótono y luego a situaciones con un mínimo y un máximo local para, finalmente, converger a casos con un máximo absoluto. Estos resultados, que no habían sido reportados en la literatura existente, fueron sugeridos por la teoría y reobtenidos mediante simulaciones de Monte Carlo.[49]

- La segunda extensión fue presentada en el Cap.4 a partir de la consideración de señales (‘rastros’, ‘olores’, etc.) que puede dejar un blanco en su entorno. El modelo desarrollado se basó nuevamente en el formalismo de *caminatas aleatorias multiestado* y se utilizó la *técnica de la inhomogeneidad local*. Si bien el resultado analítico de ‘señales’ presentado corresponde a dos inhomogeneidades simétricas, este puede ser generalizado en forma directa para incluir $N \geq 2$ inhomogeneidades (simétricas o asimétricas). Los resultados obtenidos indicaron que la *probabilidad de supervivencia* del blanco puede ser considerablemente reducida (aumentada) si el buscador es atraído (o rechazado) por el rastro ‘positivo’ (‘negativo’) dejado por el blanco. Entendemos rastro positivo (negativo) por señales que dirigen (expulsan) al buscador al (del) entorno del objetivo. Encontramos además que para una ‘capacidad de detección alta’ (rastro positivo), aumentar el tamaño de la inhomogeneidad (extensión del rastro) reduce la SP del blanco, mientras que el valor óptimo del parámetro que regula la intermitencia deja de existir, es decir, se vuelve a una búsqueda monoestado. Estos resultados ‘esperables’ (o sugeridos por la ‘intuición’) fueron corroborados por el modelo propuesto.[50]

- El Capítulo 5 refleja una pausa en la generación de extensiones (Caps. 3 y 4) al modelo original presentado en el Capítulo 2. Sin embargo, y en estrecha relación a la carac-

terización de las estrategias de búsqueda, presenta un formalismo unificado y general para la ‘estadística’ del tiempo de vida de un blanco u objetivo en presencia de un conjunto de buscadores independientes. Se desarrolló un esquema que permite tratar el desplazamiento de los buscadores en los casos de difusión normal y anómala, tanto en redes como en el espacio continuo, atrapamiento perfecto e imperfecto y puede ser extendido en forma directa al caso de blancos dinámicos o fluctuantes. Introdujimos el *tiempo medio de vida del blanco* (MTL) y establecimos las relaciones con otras magnitudes de relevancia para la estadística temporal del atrapamiento. Para los problemas de atrapamiento con un único blanco el MFPT (*tiempo medio para el primer pasaje*) es de aplicación limitada si el proceso es ‘transitorio’, puesto que puede diverger. Para una red $1D$ el MTL se torna finito al incrementar el número de caminantes, pero si $d > 1$ diverge para cualquier número de caminantes. Sin embargo, en el límite termodinámico, el MTL es finito para todas las situaciones consideradas. Esta propiedad es de sumo interés, puesto que pone de manifiesto que el MTL es la magnitud estadística adecuada para las situaciones en las cuales existe un gran número de buscadores (límite termodinámico) y un único blanco o centro de captura. El MTL demostró ser una herramienta eficiente para la caracterización de las *estrategias de búsquedas intermitentes*. Dada su dependencia explícita con los parámetros que regulan la intermitencia, permitió ajustar los mismos de forma tal de minimizar el tiempo de búsqueda. Finalmente, en este capítulo discutimos en detalle el rol de la distribución inicial de caminantes, tema poco estudiado en la literatura del área[51].

- En el Capítulo 6 retomamos el estudio del tema central de esta tesis e introducimos una nueva extensión al modelo incluyendo la posibilidad de que un encuentro buscador – blanco no resulte necesariamente en captura de este último. Para modelar este fenómeno se dotó al blanco con la capacidad de “fluctuar” entre dos estados, uno sólo de los cuales permite la captura por algún buscador. Evaluamos la Probabilidad de Supervivencia del blanco (SP), estudiando su dependencia con la tasa de transición entre sus estados y con el parámetro que caracteriza la intermitencia de los buscadores, encontrando nuevamente que la SP es una función optimizable. Este resultado pone de manifiesto los beneficios de la búsqueda intermitente en el caso de un blanco fluctuante. El MTL (herramienta que fue desarrollada en el Cap. 5) mostró adecuadamente la optimización debida a la estrategia de búsqueda intermitente y, análogamente a la SP, es una función no monótona del parámetro que regula la intermitencia de los caminantes para un amplio rango de valores de las probabilidades de transición del blanco/objetivo.[52]

En General

A partir de lo expuesto creemos haber avanzado en el estudio de los *procesos de búsqueda intermitente* en una forma consistente, ordenada y precisa, realizando un aporte importante en la construcción de un modelo representativo para la búsqueda *intermitente*. Hemos incluido en este modelo, tanto teórica como a través de simulaciones, diferentes comportamientos: sesgo (bias) y diferentes longitudes en el desplazamiento del buscador, señales (‘rastros’, ‘olores’, etc.) que puede dejar un blanco en su entorno y una dinámica propia para el blanco. Resaltamos también el formalismo general presentado para la

descripción y caracterización de la *‘estadística’ del tiempo de vida* de un blanco.

Creemos que el esquema de búsqueda presentado en esta tesis es, simple como para ser resuelto analíticamente, y lo suficientemente rico como para mostrar en forma realista la influencia de diferentes fenómenos en los procesos de búsqueda mediante estrategias intermitentes.

Por último, el resultado más significativo de este trabajo fue dilucidar, dada la estrategia de búsqueda, cuál es la forma más adecuada de llevarla a cabo¹. En este sentido, los resultados obtenidos demuestran que, en el modelo estudiado (y en todas sus extensiones), siempre es posible encontrar regímenes adecuados que optimizan la localización o encuentro.

Críticas al modelo, comentarios finales y perspectivas futuras

Si bien el modelo intenta ser representativo de una situación realista de búsqueda, presenta simplificaciones importantes, entre ellas:

‡ considerar sistemas unidimensionales. Si bien se puede asociar a la fase o estado de relocalización ‘corridas’ (desplazamientos) unidimensionales, esto no es enteramente cierto para la fase de exploración compacta o búsqueda minuciosa.

‡ suponer sólo 2 estados posibles para el caminante. El comportamiento observado en algunos casos no es necesariamente binario, sino que existen dentro de los estados de búsqueda minuciosa y relocalización ‘sub-estados’. Por ejemplo, se ha observado situaciones en las cuales el estado de búsqueda compacta involucra un sub-estado de exploración ‘lenta’ (pero con movimiento) y un sub-estado de expectación –sin desplazamiento– o táctica de ‘emboscada’.

‡ la inmovilidad espacial del blanco y el tipo de dinámica de su aparición. Los objetivos no son necesariamente inmóviles y su dinámica no es aleatoria sino que depende del entorno.

‡ falta de acople o interacción entre buscador y objetivo, sobretodo en el entorno animal (presas y depredadores) no es cierto que una presa espere su final sin ofrecer resistencia.

Una crítica en un sentido más amplio y no particular del modelo es, quizás, la falta de una comparación detallada de los resultados obtenidos teórica o simulativamente con resultados ‘de campo’. Comentamos que esta es una tarea en extremo compleja; en toda la bibliografía analizada, son contados² los casos en los cuales se intenta un contraste. Esta dificultad reside en las diferencias intrínsecas de los ámbitos de los cuales procede tanto los datos experimentales –resultados de campo– como los modelos teóricos (ámbitos biológico y físico–matemático respectivamente).

¹Debe quedar claro que no se buscaron estrategias posibles sino, dada una en particular, la forma más eficiente de implementarla

²Con no más de una mano.

A pesar de sus limitaciones los resultados obtenidos muestran una fenomenología muy amplia para el análisis y deben ser considerados como una aproximación inicial para modelos más realistas que representen situaciones de búsqueda más complejas.

Existe un gran número de posibles extensiones, alguna de las cuales están en desarrollo y otras serán analizadas en un futuro: mayores dimensiones, sistemas continuos, dinámica no-Markoviana para las transiciones entre los estados del blanco, etc.

8.0.2. Estudio del fenómeno de adsorción-desorción en interfaces como un *proceso intermitente*

En esta sección presentamos las conclusiones a las que arribamos en la descripción de un tema (cuyo detalle encontramos en el Capítulo 7) que surgió durante el desarrollo del presente trabajo de Tesis y que, si bien parece de carácter independiente al tema central de investigación, ubica a la intermitencia en un marco más amplio que el estudiado hasta el momento.

Utilizando el formalismo de ecuaciones Maestras se modeló la dinámica de un conjunto de caminantes independientes que se desplazan en un recinto cerrado del cual pueden “escapar” sólo a través de un pequeño orificio (narrow escape time problem–NET problem). Mediante el uso de la expansión de *Dyson* se obtuvo una expresión analítica para el tiempo medio del primer pasaje (MFPT), magnitud fundamental en el NET problem, y se estudió su dependencia con los parámetros que caracterizan al sistema. En particular se analizó la influencia de la difusividad sobre la superficie, la desorción desde sus bordes y las dimensiones del dominio de confinamiento. En todas las situaciones contrastamos los resultados analíticos contra simulaciones de Monte Carlo obteniendo un acuerdo altamente satisfactorio.[53]

Críticas al modelo, comentarios finales y perspectivas futuras

Algunas limitaciones respecto al estudio del fenómeno de adsorción-desorción en interfaces:

‡ La ausencia de formas diferenciadas de propagación en las interfaces. Estudios recientes, centrados en el transporte de proteínas en secuencias de ADN, han reportado la existencia de regímenes dentro de las interfaces (o planos de movimiento) que no han sido contempladas en este modelo.

‡ La dimensionalidad elegida ($2D$). Sería particularmente interesante considerar la alternancia entre transporte volumétrico y superficial, estudiando la conveniencia de uno sobre otro o si un tipo de transporte ‘mezclado’ es óptimo.

A pesar de estas limitaciones, el modelo presentado fue susceptible de ser resuelto en forma analítica y mostró ser lo suficientemente rico como para capturar en un marco unificado los ‘ingredientes’ que caracterizan al *NET problem*.

El fenómeno de difusión mediado por superficie puede ser generalizado de diversas formas: escape “imperfecto”, comportamiento “dinámico” de la ‘ventana’ de escape, desorción no-Markoviana desde las interfaces, etc. Estas generalizaciones serán encaradas en trabajos futuros.



Apéndice A

Un poco de Matemática

En los siguientes apéndices se encuentran las definiciones de las transformadas integrales utilizadas ([59]), la teoría elemental de los *teoremas Tauberianos* ([56]), la técnica de la *inhomogeneidad local* ([105, 57]), el desarrollo de *Dyson* ([106]) y una breve referencia a la rutina utilizada para la inversión numérica en *Laplace* ([60]).

A.1. Transformadas

A.1.1. Transformada de Fourier

Sea $f(x)$ una función de la variable real x , definimos la transformada de Fourier de $f(x)$ en la forma:

$$\hat{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-ikx} dx \quad \forall k \in (-\infty, \infty) \quad (\text{A.1})$$

y la correspondiente fórmula de inversión o antitransformada:

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(k)e^{ikx} dk \quad (\text{A.2})$$

Las condiciones suficientes para la existencia de la transformada de Fourier de una función $f(x)$ son:

- $f(x)$ y $f'(x)$ deben ser funciones continuas a trozos en cualquier intervalo finito $x \in (-L, L)$.
- $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|dx < \infty$
- $f(x)$ es reemplazada por $\frac{f(x+0)-f(x-0)}{2}$ si x es un punto de discontinuidad.

Cuando las funciones poseen paridad definida, la transformada de Fourier adopta la forma:

$$\hat{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \cos(kx) dx \quad (f(x)=f(-x))$$

o

$$\hat{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \sin(kx) dx \quad (f(x)=-f(-x)).$$

Transformada Discreta de Fourier

Si la variable x toma N valores que son múltiplos enteros del “parámetro de red a ”: $x = na$, con $n = 0, 1, \dots, N - 1$ y $f(x)$ es una función periódica ($f(x + aN) = f(x)$), definimos la Transformada Discreta de Fourier (DFT) como:

$$\hat{f}(k) = \sum_{n=0}^{N-1} f(na) e^{ik(q)na}, \quad (\text{A.3})$$

donde $k(q)$ toma los valores: $0, \frac{2\pi}{aN}, 2\frac{2\pi}{aN}, \dots, (N-1)\frac{2\pi}{aN}$, es decir, $k(q) = \frac{2\pi}{aN} q$, con $q = 0, 1, \dots, N - 1$.

La fórmula de inversión o antitransformada discreta es:

$$f(x) = N^{-1} \sum_{q=0}^{N-1} e^{-ik(q)x} \hat{f}(k(q)), \quad (\text{A.4})$$

en el límite $N \rightarrow \infty$ la ecuación (A.4) toma la forma:

$$f(x) = \frac{a}{(2\pi)} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} e^{-ikx} \hat{f}(k) dk.$$

La generalización de A.3 y A.4 a funciones periódicas en redes d -dimensionales ¹ es directa:

$$\hat{f}(\vec{k}) = \sum_{\vec{s}} e^{i\vec{k}(\vec{q}) \cdot a\vec{s}} f(a\vec{s}) \quad (\text{A.5})$$

donde el vector $\vec{k}(\vec{q})$ toma los valores: $\vec{k}(\vec{q}) = \frac{2\pi}{aN} \vec{q}$. Cada componente del vector $\vec{q} (= (q_1, q_2, \dots, q_d))$ toma valores enteros entre cero y $N - 1$: $q_i = 0, 1, \dots, N - 1$. La fórmula de inversión es:

$$f(\vec{r}) = N^{-d} \sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{k}(\vec{q}) \cdot \vec{r}} \hat{f}(\vec{k}(\vec{q})). \quad (\text{A.6})$$

En el lím $N \rightarrow \infty$ la ecuación (A.6) toma la forma:

$$f(\vec{r}) = \frac{a^d}{(2\pi)^d} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \dots \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \hat{f}(\vec{k}) d^d k.$$

¹ $f(\vec{r})$, con $\vec{r} = a\vec{s}$ y $\vec{s} = (s_1, s_2, \dots, s_d)$ y $s_i = 0, 1, \dots, N - 1$, es periódica en una red hipercúbica d -dimensional si: $f(s_1 + N, s_2, \dots, s_d) = f(s_1, s_2 + N, \dots, s_d), \dots, f(s_1, s_2 + N, \dots, s_d + N)$.

A.1.2. Transformada de Laplace

Dada una función de la variable real t definimos su transformada de Laplace $f(u)$ en la forma:

$$\hat{f}(u) = \int_0^{\infty} e^{-ut} f(t) dt \quad (\text{A.7})$$

donde u es la variable conjugada de t y toma valores en el plano complejo \mathbb{C} . Si la integral A.7 converge para $u = u_0$ ($u_0 \in \mathbb{R}$) es decir, si:

$$\lim_{\substack{A \rightarrow 0 \\ B \rightarrow \infty}} \int_A^B e^{-u_0 t} f(t) dt,$$

existe, entonces converge para todo u tal que $\Re(u) > u_0$ y la imagen es una función analítica univaluada de u en el plano $\Re(u) > u_0$.

Dada $\hat{f}(u)$ podemos hallar su antitransformada ($f(t)$) mediante la expresión

$$f(t) = \frac{1}{2\pi i} \lim_{T \rightarrow \infty} \int_{u_0 - iT}^{u_0 + iT} e^{ut} \hat{f}(u) du = \frac{1}{2\pi i} \int_{u_0 - i\infty}^{u_0 + i\infty} e^{ut} \hat{f}(u) du$$

donde u_0 es elegido de tal forma que todos los puntos singulares de $\hat{f}(u)$ se ubican a la izquierda de la línea $\Re(u) > u_0$ del plano complejo u .

Una transformada (y su antitransformada) de uso frecuente en este trabajo es la siguiente:

$$\hat{f}(u) = \frac{\Gamma(k)}{u + a} \quad (k > 0) \longrightarrow f(t) = t^{k-1} e^{-at}$$

A.2. Teoremas Tauberianos

Los teoremas Tauberianos permiten inferir propiedades asintóticas del comportamiento de una función en el límite de tiempos grandes a partir de su transformada. Estos teoremas se aplican tanto a series de potencias (tiempo discreto) como a transformadas integrales (tiempo continuo).

En lo que sigue nos sera de utilidad la siguiente definición y notacion:

- Decimos que $L(x)$ varía suavemente para $x \rightarrow x_0$, si para cada constante $c > 0$, se satisface que: $\lim_{x \rightarrow x_0} \frac{L(cx)}{L(x)} = 1$.
- Mediante el caracter \sim denotamos el comportamiento dominante (asintotico) de una funcion cuando su argumento tiende a algun valor particular (posiblemente 0 o ∞).

En particular un teorema Tauberiano muy importante para tiempo discreto es el siguiente:

Teorema 1 Sea $f(y)$ una serie de potencias en e^{-y} , con $y \in \mathfrak{R}$, definida por

$$f(y) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n e^{-ny}$$

con $f_n > 0$. Supongamos que:

$$\lim_{y \rightarrow 0} \sim y^{-\alpha} L(y^{-1})$$

donde $L(x)$ es una función que varía suavemente. Entonces:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=0}^n f_j \sim \frac{n^\alpha L(n)}{\Gamma(1 + \alpha)}$$

Es posible encontrar resultados análogos para las transformadas de Laplace (tiempo continuo)[77].

Notemos que dada $f(t)$ y su transformada:

$$\hat{f}(u) = \int_0^{\infty} e^{-ut} f(t) dt,$$

la misma puede interpretarse como la generalización al continuo de la “transformada z”:

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n z^n$$

en la cual el parámetro z es reemplazado por e^{-u} y la suma por una integral.

El teorema Tauberiano para tiempo continuo que será utilizado en este trabajo es el siguiente [77]:

Teorema 2 1 Sea $\hat{f}(u)$ la transformada de Laplace de $f(t)$, y $L(u)$ una función que varía en forma suave en $u = 0$. Supongamos además que:

$$\hat{f}(u) \sim u^{-\alpha} L(u) \quad \alpha \geq 0$$

Si definimos:

$$f(t) = \int_0^t f(\tau) d\tau$$

entonces en el $\lim t \rightarrow \infty$:

$$f(t) \sim \frac{t^{\alpha-1} L(t)}{\Gamma(1 + \alpha)} \tag{A.8}$$

Apéndice B

Escaleo en λ

En diferentes pasajes de esta tesis indicamos que medimos el tiempo en unidades de la constante de difusión (λ), es lo que usualmente se entiende como escaleo (en la variable propuesta). A continuación mostramos un ejemplo del escaleo propuesto, partimos de,

$$P(k, u|0, t = 0) = \frac{N(k; u, \gamma_1, \gamma_2)}{D(k; u, \gamma_1, \gamma_2)}, \quad (\text{B.1})$$

donde:

$$N(k; u, \gamma_1, \gamma_2) = g_1(u - \lambda(p_2(k) - 1)) + g_2(u - \lambda(p_1(k) - 1)) + (\gamma_1 + \gamma_2) \quad (\text{B.2})$$

$$D(k; u, \gamma_1, \gamma_2) = (u - \lambda(p_1(k) - 1))(u - \lambda(p_2(k) - 1)) + \gamma_1(u - \lambda(p_2(k) - 1)) + \gamma_2(u - \lambda(p_1(k) - 1)) \quad (\text{B.3})$$

Si definimos $a_1 = p_2(k) - 1$, $a_2 = p_1(k) - 1$, podemos escribir entonces:

$$P(k, u|0, t = 0) = \frac{\lambda g_1(\frac{u}{\lambda} - a_1) + \lambda g_2(\frac{u}{\lambda} - a_2) + \lambda(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{\lambda})}{\lambda^2(\frac{u}{\lambda} - a_2)(\frac{u}{\lambda} - a_1) + \lambda^2 \frac{\gamma_1}{\lambda}(\frac{u}{\lambda} - a_1) + \lambda^2 \frac{\gamma_2}{\lambda}(\frac{u}{\lambda} - a_2)} \quad (\text{B.4})$$

Es decir:

$$P(k, u|0, t = 0) = \frac{1}{\lambda} \frac{N(k; \frac{u}{\lambda}, \frac{\gamma_1}{\lambda}, \frac{\gamma_2}{\lambda})}{D(k; \frac{u}{\lambda}, \frac{\gamma_1}{\lambda}, \frac{\gamma_2}{\lambda})} = \frac{1}{\lambda} \frac{N(k; \tilde{u}, \tilde{\gamma}_1, \tilde{\gamma}_2)}{D(k; \tilde{u}, \tilde{\gamma}_1, \tilde{\gamma}_2)} \quad (\text{B.5})$$

Y la antitransformada de Laplace toma la forma,

$$P(k, t|0, t = 0) = \frac{1}{2\pi i} \int_{u_0 - i\infty}^{u_0 + i\infty} \frac{1}{\lambda} \frac{N(k; \tilde{u}, \tilde{\gamma}_1, \tilde{\gamma}_2)}{D(k; \tilde{u}, \tilde{\gamma}_1, \tilde{\gamma}_2)} e^{ut} du$$

o

$$P(k, t|0, t = 0) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\tilde{u}_0 - i\infty}^{\tilde{u}_0 + i\infty} \frac{N(k; \tilde{u}, \tilde{\gamma}_1, \tilde{\gamma}_2)}{D(k; \tilde{u}, \tilde{\gamma}_1, \tilde{\gamma}_2)} e^{\tilde{u}\tilde{t}} d\tilde{u} \quad (\text{B.6})$$

donde $\tilde{t} = \lambda t$.

Si bien en el presente desarrollo realizamos la asignación $\frac{u}{\lambda} \mapsto \tilde{u}$, $\frac{\gamma_i}{\lambda} \mapsto \tilde{\gamma}_i$, en el trabajo mantenemos la notación original. Es decir u, γ_1, γ_2, t , los cuales deben leerse como $\tilde{u}, \tilde{\gamma}_1, \tilde{\gamma}_2, \tilde{t}$.

Apéndice C

Técnica de la inhomogeneidad local

En este apartado exponemos en forma resumida los conceptos esenciales de la *Técnica de la inhomogeneidad local*. La presentación sigue el lineamiento propuesto por *Budde* ([105]), el cual constituye una generalización de resultados obtenidos por *Montroll* ([57]).

Supongamos que una partícula realiza una caminata aleatoria en un medio infinito en el cual se localiza una impureza (‘inhomogeneidad’) en el sitio \vec{s}_1 y que exista invariancia traslacional para todos los otros sitios. Para este caso la densidad de ‘tiempos de pausa’ o densidad de probabilidad de que el caminante realice una transición al sitio \vec{s} entre t y $t + dt$ dado que arribó al sitio \vec{s}' en $t = 0$ viene dada por:

$$\Psi(\vec{s}, \vec{s}'; t) = \begin{cases} \Psi^0(\vec{s} - \vec{s}'; t) & \text{si } \vec{s}' \neq \vec{s}_1 \\ \Psi^1(\vec{s}, \vec{s}_1; t) & \text{si } \vec{s}' = \vec{s}_1 \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

Recordamos que $\Psi(\vec{s}, \vec{s}'; t)$ fue definida en forma más general (con estados internos) en el Capítulo 2 para un sistema homogéneo ($\Psi(\vec{s}, \vec{s}'; t) \equiv \Psi^0(\vec{s} - \vec{s}'; t)$) La información relacionada a la ‘inhomogeneidad’ se encuentra contenida en $\Psi^1(\vec{s}, \vec{s}_1; t)$.

Sea $R(\vec{s}, t | \vec{s}_0, t = 0)dt$ la probabilidad de *arribar* al sitio \vec{s} entre t y $t + dt$ dado que partió de \vec{s}_0 en $t = 0$. De la definición debe quedar claro que $R(\vec{s}, t | \vec{s}_0, t = 0)dt$ es distinta de $P(\vec{s}, t | \vec{s}_0, t = 0)$ ¹ que es la probabilidad de *estar* en \vec{s} al tiempo t dado que partió de \vec{s}_0 en $t = 0$. Por simplicidad adoptamos la notación $R(\vec{s}, t | \vec{s}_0, t = 0) \equiv R(\vec{s}, t)$ y $P(\vec{s}, t | \vec{s}_0, t = 0) \equiv P(\vec{s}, t)$.

$R(\vec{s}, t)$ satisface la siguiente ecuación integral

$$R(\vec{s}, t) - \sum_{\vec{s}'} \int_0^t R(\vec{s}', t') \Psi(\vec{s}, \vec{s}'; t - t') dt' = \delta_{\vec{s}, \vec{s}_0} \delta_{t, 0+} \quad (\text{C.2})$$

¹Magnitud principal utilizada a lo largo de esta tesis.

²Pudiendo haber arribado antes y permanecido allí hasta t .

o su versión en el espacio de Laplace:

$$\hat{R}(\vec{s}, u) = \sum_{\vec{s}'} \hat{R}(\vec{s}', u) \hat{\Psi}(\vec{s}, \vec{s}'; u) + \delta_{\vec{s}, \vec{s}_0} \quad (\text{C.3})$$

donde $\Psi(\vec{s}, \vec{s}'; t)$ es la definida en la ecuación (C.1).

La solución de la ecuación C.3 (o C.2 equivalentemente) se obtiene en términos de la función de Green homogénea,

$$\hat{R}_0(\vec{s}, u) = \sum_{\vec{s}'} \hat{R}_0(\vec{s}', u) \hat{\Psi}^0(\vec{s}, \vec{s}'; u) + \delta_{\vec{s}, \vec{0}} \quad (\text{C.4})$$

Notemos que $\hat{R}_0(\vec{s}, u)$ es justamente la solución del problema homogéneo (sin impurezas u inhomogeneidades).

Utilizando (C.1) en (C.3) resulta,

$$\hat{R}(\vec{s}, u) = \sum_{\vec{s}'} \hat{R}(\vec{s}', u) \hat{\Psi}^0(\vec{s} - \vec{s}'; u) + \hat{\Psi}^1(\vec{s}, \vec{s}_1; u) \hat{R}(\vec{s}_1, u) - \hat{\Psi}^0(\vec{s} - \vec{s}_1; u) \hat{R}(\vec{s}_1, u) + \delta_{\vec{s}, \vec{s}_0} \quad (\text{C.5})$$

Utilizando la ecuación (C.4) obtenemos para $R(\vec{s}, u)$:

$$\begin{aligned} \hat{R}(\vec{s}, u) &= \hat{R}_0(\vec{s} - \vec{s}_0, u) - \hat{R}(\vec{s}_1, u) \left[\hat{R}_0(\vec{s} - \vec{s}_1, u) - \delta_{\vec{s}, \vec{s}_1} \right] \\ &\quad + \hat{R}(\vec{s}_1, u) \left[\sum_{\vec{s}'} \hat{\Psi}^1(\vec{s}', \vec{s}_1, u) \hat{R}_0(\vec{s} - \vec{s}', u) \right] \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

La expresión anterior es válida para todo \vec{s} ; evaluando en $\vec{s} = \vec{s}_1$ tenemos que:

$$\hat{R}(\vec{s}_1, u) = \frac{\hat{R}_0(\vec{s}_1 - \vec{s}_0, u)}{\hat{R}_0(\vec{0}, u) - \sum_{\vec{s}'} \hat{\Psi}^1(\vec{s}', \vec{s}_1, u) \hat{R}_0(\vec{s}_1 - \vec{s}', u)} \quad (\text{C.7})$$

Hemos obtenido $R(\vec{s}_1, u)$ en términos de la solución del problema homogéneo R_0 . Para un valor $\vec{s} \neq \vec{s}_1$ reemplazamos la expresión anterior en la ecuación (C.6). La probabilidad de hallar a la partícula en \vec{s} al tiempo t se calcula mediante la siguiente expresión:

$$P(\vec{s}, t) = \int_0^t R(\vec{s}, t') V(\vec{s}, t - t') dt' \quad (\text{C.8})$$

donde

$$V(\vec{s}, t) = 1 - \int_0^t \sum_{\vec{s}'} \Psi(\vec{s}', \vec{s}, t') dt', \quad (\text{C.9})$$

es la probabilidad de que la partícula se encuentre *todavía* en \vec{s} al tiempo t .

La ecuación (C.8) expresa el hecho de que la probabilidad de *hallar* a la partícula en \vec{s} es el producto de la probabilidad de haber *arribado* a ese sitio en algún tiempo anterior a t por la probabilidad de permanecer en \vec{s} hasta t . En el espacio de Laplace podemos escribir (C.8) en la forma:

$$\hat{P}(\vec{s}, u) = \hat{R}(\vec{s}, u) \hat{V}(\vec{s}, u). \quad (\text{C.10})$$

Apéndice D

Desarrollo de Dyson

En esta sección presentamos un método analítico para resolver ecuaciones matriciales debido a *Dyson* ([106]). Este desarrollo permite hallar, en forma cerrada, la solución de problemas con perturbaciones a partir de una solución conocida del problema sin perturbar.

En muchos problemas de la física estadística y la mecánica cuántica debe hallarse una matriz \mathbb{G} que satisface la siguiente ecuación matricial:

$$[s\mathbb{I} - \mathbb{H}]\mathbb{G} = \mathbb{I} \quad (\text{D.1})$$

donde s es una variable arbitraria.

Supongamos que una matriz \mathbb{H} puede ser descompuesta como suma de dos matrices:

$$\mathbb{H} = \mathbb{H}_0 + \mathbb{H}_1 \quad (\text{D.2})$$

donde \mathbb{H}_0 representa al sistema sin perturbar y \mathbb{H}_1 la perturbación.

Si la solución al sistema no perturbado es \mathbb{G}_0 tal que:

$$[s\mathbb{I} - \mathbb{H}_0]\mathbb{G}_0 = \mathbb{I} \quad (\text{D.3})$$

mostraremos que \mathbb{G} admite la siguiente representación,

$$\mathbb{G} = \mathbb{G}_0 + \mathbb{G}_0\mathbb{H}_1\mathbb{G}_0 + \mathbb{G}_0\mathbb{H}_1\mathbb{G}_0\mathbb{H}_1\mathbb{G}_0 + \dots \quad (\text{D.4})$$

Si el producto,

$$[s\mathbb{I} - \mathbb{H}][\mathbb{G}_0 + \mathbb{G}_0\mathbb{H}_1\mathbb{G}_0 + \mathbb{G}_0\mathbb{H}_1\mathbb{G}_0\mathbb{H}_1\mathbb{G}_0 + \dots], \quad (\text{D.5})$$

corresponde a la matriz identidad, quedaría demostrada la expansión de \mathbb{G} . Teniendo en cuenta que:

$$[s\mathbb{I} - \mathbb{H}_0] = \mathbb{G}_0^{-1} \quad (\text{D.6})$$

y por lo tanto

$$[s\mathbb{I} - \mathbb{H}] = [(\mathbb{G}_0)^{-1} - \mathbb{H}_1]. \quad (\text{D.7})$$

Reemplazando $[s\mathbb{I} - \mathbb{H}]$ por la expansión de \mathbb{G} resulta:

$$[\mathbb{G}_0^{-1} - \mathbb{H}_1][\mathbb{G}_0 + \mathbb{G}_0\mathbb{H}_1\mathbb{G}_0 + \mathbb{G}_0\mathbb{H}_1\mathbb{G}_0\mathbb{H}_1\mathbb{G}_0 + \dots] \quad (\text{D.8})$$

Haciendo uso de las propiedades distributivas del producto de matrices obtenemos:

$$[\mathbb{I} + \mathbb{H}_1\mathbb{G}_0 + \mathbb{H}_1\mathbb{G}_0\mathbb{H}_1\mathbb{G}_0 + \dots - \mathbb{H}_1\mathbb{G}_0 - \mathbb{H}_1\mathbb{G}_0\mathbb{H}_1\mathbb{G}_0 - \dots] \quad (\text{D.9})$$

En la ecuación (D.9) únicamente sobrevive la identidad, de manera que la expansión de \mathbb{G} queda demostrada. A esta propiedad se la conoce como *Identidad de Dyson*, que para algunos casos especiales puede resolverse de manera sencilla.

Sea, por ejemplo, \mathbb{H}_1 definida por sus componentes de la siguiente manera

$$[\mathbb{H}_1]_{i;j} = \begin{cases} \Delta & \text{si } i = l, j = m \\ 0 & \text{de otro modo} \end{cases} \quad (\text{D.10})$$

Si suponemos \mathbb{G}_0 conocida, podemos hallar los elementos de \mathbb{G} ; escribiendo su desarrollo en la forma,

$$[\mathbb{G}]_{i;j} = [\mathbb{G}_0]_{i;j} + \Delta[\mathbb{G}_0]_{i;l}[\mathbb{G}_0]_{m;j} \{1 + \Delta[\mathbb{G}_0]_{m;l} + ([\mathbb{G}_0]_{m;l}\Delta)^2 + \dots + ([\mathbb{G}_0]_{m;l}\Delta)^n + \dots\} \quad (\text{D.11})$$

o

$$[\mathbb{G}]_{i;j} = [\mathbb{G}_0]_{i;j} + [\mathbb{G}_0]_{i;l}[\mathbb{G}_0]_{m;j} \frac{\Delta}{1 - \Delta[\mathbb{G}_0]_{m;l}} \quad (\text{D.12})$$

donde utilizamos el desarrollo $(1 - x)^{-1} = 1 + x + x^2 \dots$

Por otro lado, si \mathbb{H} consta de más de un elemento distinto de cero, podemos hallar la solución descomponiendo \mathbb{H} en una suma de matrices con un sólo componente distinto de cero y aplicando en forma reiterada la *Identidad de Dyson*.

Apéndice E

Inversión Numérica en Laplace

En esta sección presentamos brevemente la idea fundamental del algoritmo de inversión utilizado en este trabajo ([60]).

La rutina tiene como base la Transformación Suave (usualmente llamada “continuación analítica por regularización del contorno”) definida por:

$$F_R(c + u) = \int_0^\infty F(c + ux)\delta_R(x - 1) dx \quad p, c \in \mathbb{C} \quad (\text{E.1})$$

y

$$\delta_R \text{ es tal que } \lim_{R \rightarrow \infty} \delta_R = \delta \quad (\text{delta de Dirac}) \quad (\text{E.2})$$

$$F_{R \rightarrow \infty}(c + u) \rightarrow F(c + u) \quad (\text{E.3})$$

R es el parámetro de regularización (en general existen más de uno). Tomando $c = 0$ en E.1 definimos la antitransformada de F_R :

$$f_R(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_0^\infty F_R(u)e^{ut} du = \frac{1}{2\pi i} \int_0^\infty \int_0^\infty f(ux) e^{ut} \delta_R(x - 1) du dx \quad (\text{E.4})$$

$$f_R(t) = \int_0^\infty f(xt)\delta_R(x - 1)dx \quad (\text{E.5})$$

La última igualdad se obtiene a partir de la definición de E.1.

El problema se reduce entonces (en una interpretación poco precisa) a la aproximación de la función δ_R .

Existen diferentes métodos de aproximación, entre ellos:

$$\delta_N(x-1) = \frac{N^{N+1} x^N e^{-Nx}}{N!} \quad (\text{Post - Widder}) \quad (\text{E.6})$$

$$\delta_N(x-1) = \frac{(2N)! \ln(2) (2^{-x} - 2^{-2x})^N}{N! (N-1)!} \quad (\text{Gaver}) \quad (\text{E.7})$$

$$\delta_{R,a,\alpha}(x-1) = \frac{e^{\alpha(1-x)} x^a \sin(R \ln(x))}{(x-1)\pi} \quad (\text{Kryshniy}) \quad (\text{E.8})$$

La rutina [60] utiliza la última de las aproximaciones y funciona como una caja negra: se ingresa la función a antitransformar, el tiempo para cuyo valor se requiere la antitransformada y, eventualmente, los parámetros necesarios para lograr una mejor convergencia.

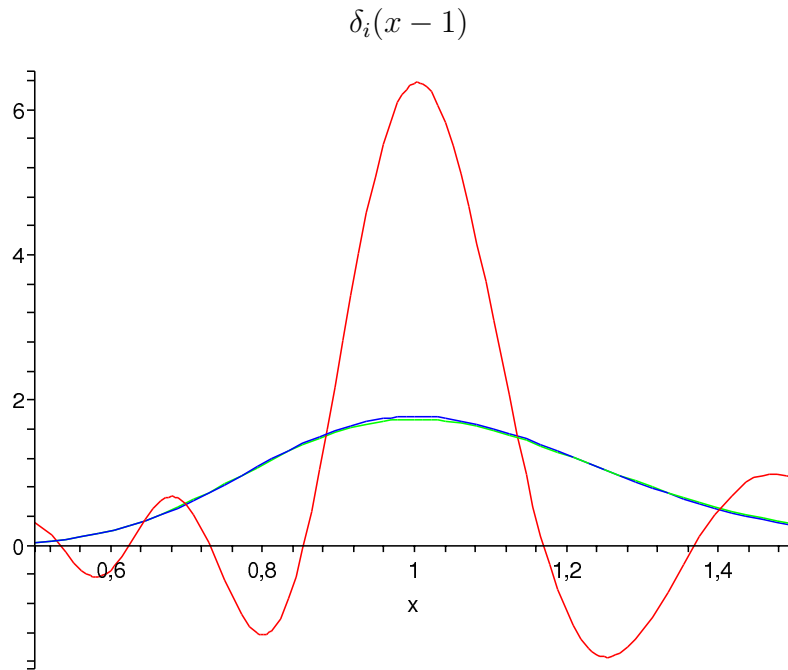


Figura E.1: La gráfica corresponden a $\delta_i(x-1)$ para Kryshniy, Gaver y Post-Widder (en rojo, azul y verde, respectivamente) para $R = 20$, $a = 1$, $\alpha = 0$ y $N = 20$

Apéndice F

Publicaciones

Las siguientes publicaciones fueron producto del trabajo de tesis desarrollado:

1. F. Rojo, C. E. Budde and H. S. Wio, “*Optimal Intermittent Search Strategies*”, J. Phys. A: Math. Theor. **42** (2009) 125002
2. J. Revelli, F. Rojo, C. E. Budde and H. S. Wio, *Optimal Intermittent Search Strategies: “smelling” the prey*, J. Phys. A: Math. Theor. **43** (2010) 195001
3. F. Rojo, J. Revelli, C. E. Budde, H. S. Wio, G. Oshanin and Katja Lindenberg, *Intermittent search strategies revisited: effect of the jump length and biased motion*, J. Phys. A: Math. Theor. **43** (2010) 345001
4. F. Rojo, P. A. Pury and C. E. Budde, *Lifetime of a target in the presence of N independent walkers*, Physica A **389** (2010) 3399-3408
5. Félix Rojo, Pedro A. Pury, and Carlos E. Budde, *Intermittent pathways towards a dynamical target*, Phys. Rev. E **83**, 011116 (2011)
6. Félix Rojo and Carlos E. Budde, *Enhanced diffusion through surface excursion: A master-equation approach to the narrow-escape-time problem*, Phys. Rev. E **84**, 021117 (2011)

Bibliografía

- [1] M. G. E. da Luz, A. Grosberg, E. P. Raposo, and G. M. Viswanathan, “The random search problem: trends and perspectives,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 42, no. 43, p. 430301, 2009.
- [2] A. V. Chechkin, I. M. Zaid, M. A. Lomholt, I. M. Sokolov, and R. Metzler, “Bulk-mediated surface diffusion along a cylinder: Propagators and crossovers,” *Phys. Rev. E*, vol. 79, p. 040105, Apr 2009.
- [3] G. c. v. Tkačik and W. Bialek, “Diffusion, dimensionality, and noise in transcriptional regulation,” *Phys. Rev. E*, vol. 79, p. 051901, May 2009.
- [4] O. Bénichou, C. Loverdo, and R. Voituriez, “How gene colocalization can be optimized by tuning the diffusion constant of transcription factors,” *EPL*, vol. 84, no. 3, p. 38003, 2008.
- [5] M. A. Lomholt, B. van den Broek, S.-M. J. Kalisch, G. J. L. Wuite, and R. Metzler, “Facilitated diffusion with DNA coiling,” *Proc. Natl. Acad. Sci.*, vol. 106, no. 20, pp. 8204–8208, 2009.
- [6] J. A. Revelli, C. E. Budde, and H. S. Wio, “Bulk-mediated surface diffusion: non-markovian desorption and biased behaviour in an infinite system,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 17, no. 49, p. S4175, 2005.
- [7] J. A. Revelli, C. E. Budde, D. Prato, and H. S. Wio, “Bulk-mediated surface diffusion: non-markovian desorption dynamics,” *New Journal of Physics*, vol. 7, no. 1, p. 16, 2005.
- [8] P. G. de Gennes, “Polymers at an interface; a simplified view,” *Advances in Colloid and Interface Science*, vol. 27, no. 3-4, pp. 189 – 209, 1987.
- [9] J. F. Douglas, H. E. Johnson, and S. Granick, “A simple kinetic model of polymer adsorption and desorption,” *Science*, vol. 262, no. 5142, pp. 2010–2012, 1993.
- [10] B. L. Carvalho, P. Tong, J. S. Huang, T. A. Witten, and L. J. Fetters, “Adsorption of end-functionalized polymers on colloidal spheres,” *Macromolecules*, vol. 26, no. 17, pp. 4632–4639, 1993.

- [11] O. V. Bychuk and B. O’Shaughnessy, “Anomalous diffusion at liquid surfaces,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 74, pp. 1795–1798, Mar 1995.
- [12] J. H. Clint, *Surfactant Aggregation*. Chapman and Hall, New York, 1992.
- [13] L. Stone, *Theory of Optimal Search*. Arlington, VA: Operations Research of America, 1989.
- [14] P. J. Nahin, *Chases and Escapes: The Mathematics of Pursuit and Evasion*. Princeton, New Jersey: Princeton University Press, 2007.
- [15] O. Bénichou, C. Loverdo, M. Moreau, and R. Voituriez, “Intermittent search strategies,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 83, p. 81, Mar 2011.
- [16] M. F. Shlesinger, “Random searching,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 42, no. 43, p. 434001, 2009.
- [17] J. Bell, *Searching Behavior, The Behavioural Ecology of Finding Resources*. London: Chapman and Hall Animal Behaviour Series, 1991.
- [18] D. Stephens and J. Krebs, *Foraging Theory*. Princeton, NJ: Princeton University Press, 1986.
- [19] W. O’Brien, H. Browman, and B. Evans, “Search strategies of foraging animals,” *American Scientist*, vol. 78, pp. 152–160, 1990.
- [20] D. Kramer and R. Mclaughlin, “The behavioral ecology of intermittent locomotion,” *American Zoologist*, vol. 41, pp. 137–157, 2001.
- [21] A. G. McAdam and D. L. Kramer, “Vigilance as a benefit of intermittent locomotion in small mammals,” *Animal Behaviour*, vol. 55, no. 1, pp. 109 – 117, 1998.
- [22] M. J. Weissburg and R. K. Zimmer-Faust, “Odor plumes and how blue crabs use them in finding prey.,” *Journal of Experimental Biology*, vol. 197, no. 1, pp. 349–75, 1994.
- [23] G. A. Nevitt, “Olfactory foraging by antarctic procellariiform seabirds: Life at high reynolds numbers,” *Biological Bulletin*, vol. 198, no. 2, pp. 245–253, 2000.
- [24] G. A. Nevitt, M. Losekoot, and H. Weimerskirch, “Evidence for olfactory search in wandering albatross, *diomedea exulans*,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 105, no. 12, pp. 4576–4581, 2008.
- [25] M. C. Ferner and M. J. Weissburg, “Slow-moving predatory gastropods track prey odors in fast and turbulent flow,” *Journal of Experimental Biology*, vol. 208, no. 5, pp. 809–819, 2005.
- [26] J. L. Spouge, A. Szabo, and G. H. Weiss, “Single-particle survival in gated trapping,” *Phys. Rev. E*, vol. 54, pp. 2248–2255, Sep 1996.

- [27] G. Viswanathan, E. Raposo, and M. da Luz, “Lévy flights and superdiffusion in the context of biological encounters and random searches,” *Physics of Life Reviews*, vol. 5, no. 3, pp. 133 – 150, 2008.
- [28] A. M. Reynolds, “Truncated lévy walks are expected beyond the scale of data collection when correlated random walks embody observed movement patterns,” *Journal of The Royal Society Interface*, 2011.
- [29] A. Reynolds, J. Swain, A. Smith, A. Martin, and J. Osborne, “Honeybees use a lévy flight search strategy and odour-mediated anemotaxis to relocate food sources,” *Behavioral Ecology and Sociobiology*, vol. 64, pp. 115–123, 2009. 10.1007/s00265-009-0826-2.
- [30] G. Oshanin, H. S. Wio, K. Lindenberg, and S. F. Burlatsky, “Intermittent random walks for an optimal search strategy: one-dimensional case,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 19, no. 6, p. 065142, 2007.
- [31] A. M. Reynolds, “On the intermittent behaviour of foraging animals,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 75, no. 4, p. 517, 2006.
- [32] O. Bénichou, M. Coppey, M. Moreau, P.-H. Suet, and R. Voituriez, “Optimal search strategies for hidden targets,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 94, p. 198101, May 2005.
- [33] O. Bénichou, C. Loverdo, M. Moreau, and R. Voituriez, “A minimal model of intermittent search in dimension two,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 19, no. 6, p. 065141, 2007.
- [34] F. Bartumeus, M. G. E. da Luz, G. M. Viswanathan, and J. Catalan, “Animal search strategies: A quantitative random-walk analysis,” *Ecology*, vol. 86, no. 11, pp. 3078–3087, 2005.
- [35] E. P. Raposo, S. V. Buldyrev, M. G. E. da Luz, M. C. Santos, H. E. Stanley, and G. M. Viswanathan, “Dynamical robustness of lévy search strategies,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 91, p. 240601, Dec 2003.
- [36] F. Bartumeus, J. Catalan, U. L. Fulco, M. L. Lyra, and G. M. Viswanathan, “Optimizing the encounter rate in biological interactions: Lévy versus brownian strategies,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 88, p. 097901, Feb 2002.
- [37] G. M. Viswanathan, S. V. Buldyrev, S. Havlin, M. G. E. da Luz, E. P. Raposo, and H. E. Stanley, “Optimizing the success of random searches,” *Nature*, vol. 401, pp. 911–914, Oct 1999.
- [38] M. F. Shlesinger, “Mathematical physics: Search research,” *Nature*, vol. 443, pp. 281–282, Sep 2006.
- [39] O. Bénichou, M. Coppey, M. Moreau, and R. Voituriez, “Intermittent search strategies: When losing time becomes efficient,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 75, no. 2, p. 349, 2006.

- [40] Z. Pasternak, F. Bartumeus, and F. W. Grasso, “Lévy-taxis: a novel search strategy for finding odor plumes in turbulent flow-dominated environments,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 42, no. 43, p. 434010, 2009.
- [41] C. Loverdo, O. Bénichou, M. Moreau, and R. Voituriez, “Robustness of optimal intermittent search strategies in one, two, and three dimensions,” *Phys. Rev. E*, vol. 80, p. 031146, Sep 2009.
- [42] S. Benhamou, “How many animals really do the lévy walk?,” *Ecology*, vol. 88, pp. 1962–1969, 2007.
- [43] A. James, M. J. Plank, and A. M. Edwards, “Assessing lévy walks as models of animal foraging,” *Journal of The Royal Society Interface*, 2011.
- [44] A. M. Edwards, R. A. Phillips, N. W. Watkins, M. P. Freeman, E. J. Murphy, V. Afanasyev, S. V. Buldyrev, M. G. E. da Luz, E. P. Raposo, H. E. Stanley, and G. M. Viswanathan, “Revisiting Lévy flight search patterns of wandering albatrosses, bumblebees and deer,” *Nature*, vol. 449, pp. 1044–1048, oct 2007.
- [45] N. E. Humphries, N. Queiroz, J. R. M. Dyer, N. G. Pade, M. K. Musyl, K. M. Schaefer, D. W. Fuller, J. M. Brunnschweiler, T. K. Doyle, J. D. R. Houghton, G. C. Hays, C. S. Jones, L. R. Noble, V. J. Wearmouth, E. J. Southall, and D. W. Sims, “Environmental context explains Lévy and Brownian movement patterns of marine predators,” *Nature*, vol. 465, pp. 1066–1069, jun 2010.
- [46] B. Alberts, A. Johnson, J. Lewis, M. Raff, K. Roberts, and P. Walter, *Molecular Biology of the Cell*. Garland Science, 5 ed., Nov. 2007.
- [47] M. F. Shlesinger and E. W. Montroll, “On the williams–watts function of dielectric relaxation,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 81, no. 4, pp. 1280–1283, 1984.
- [48] F. Rojo, C. E. Budde, and H. S. Wio, “Optimal intermittent search strategies,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 42, no. 12, p. 125002, 2009.
- [49] F. Rojo, J. Revelli, C. E. Budde, H. S. Wio, G. Oshanin, and K. Lindenberg, “Intermittent search strategies revisited: effect of the jump length and biased motion,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 43, no. 34, p. 345001, 2010.
- [50] J. A. Revelli, F. Rojo, C. E. Budde, and H. S. Wio, “Optimal intermittent search strategies: smelling the prey,” *J. Phys. A: Math. Theor.*, vol. 43, no. 19, p. 195001, 2010.
- [51] F. Rojo, P. A. Pury, and C. E. Budde, “Lifetime of a target in the presence of n independent walkers,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 389, no. 17, pp. 3399 – 3408, 2010.

- [52] F. Rojo, P. A. Pury, and C. E. Budde, “Intermittent pathways towards a dynamical target,” *Phys. Rev. E*, vol. 83, p. 011116, Jan 2011.
- [53] F. Rojo and C. E. Budde, “Enhanced diffusion through surface excursion: A master-equation approach to the narrow-escape-time problem,” *Phys. Rev. E*, vol. 84, p. 021117, Aug 2011.
- [54] F. Bartumeus, J. Catalan, U. L. Fulco, M. L. Lyra, and G. M. Viswanathan, “Erratum: Optimizing the encounter rate in biological interactions: Lévy versus brownian strategies [phys. rev. lett. 88, 097901 (2002)],” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 89, p. 109902, Aug 2002.
- [55] K. J. Blumen A. and Z. G., *Models for Reaction Dynamics in Glasses in Optical Spectroscopy of Glasses, I Zschokke, Ed.* Dordrecht: Reidel Publishing Co., 1985.
- [56] G. H. Weiss, *Aspects and Applications of the Random Walk in Random Materials and Processes, H.E. Stanley and E. Guyon, Eds.* New York: North Holland, 1994.
- [57] E. Montroll and B. West, *On an Enriched Collection of Stochastic Processes in Fluctuation Phenomena, E. Montroll E and J. Lebowitz, Eds.* New York: North Holland, 1979.
- [58] J. W. Haus and K. W. Kehr, “Diffusion in regular and disordered lattices,” *Physics Reports*, vol. 150, no. 5-6, pp. 263 – 406, 1987.
- [59] M. Abramowitz and I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions.* Dover, New York, 1965.
- [60] V. V. Kryzhniy, “On regularization method for numerical inversion of laplace transforms,” *Journal of Inverse and Ill-posed Problems*, vol. 12, pp. 279–296, 2004.
- [61] G. Oshanin, K. Lindenberg, H. S. Wio, and S. Burlatsky, “Efficient search by optimized intermittent random walks,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 42, no. 43, p. 434008, 2009.
- [62] G. Oshanin, O. Vasilyev, P. L. Krapivsky, and J. Klafter, “Survival of an evasive prey,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 106, no. 33, pp. 13696–13701, 2009.
- [63] B. Hughes, *Random Walks and Random Environments: Random Walks Vol 1.* Clarendon Press, 1995.
- [64] M. A. Ré, C. E. Budde, and M. O. Cáceres, “Survival probability in the presence of a dynamic trap,” *Phys. Rev. E*, vol. 54, pp. 4427–4430, Oct 1996.
- [65] A. J. F. Siegert, “On the first passage time probability problem,” *Phys. Rev.*, vol. 81, pp. 617–623, Feb 1951.
- [66] J. B. T. M. Roerdink and K. E. Shuler, “Asymptotic properties of multistate random walks. i. theory,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 40, pp. 205–240, 1985.

- [67] D. D.A. and A. Siegert, “The first passage problem for a continuous markov process,” *Ann. Math. Stat.*, vol. 24, pp. 624–639, 1953.
- [68] N. G. van Kampen, “Composite stochastic processes,” *Physica A: Statistical and Theoretical Physics*, vol. 96, no. 3, pp. 435 – 453, 1979.
- [69] J. Revelli, C. Budde, D. Prato, and H. Wio, “Bulk mediated surface diffusion: finite bulk case,” *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, vol. 37, pp. 205–212, 2003.
- [70] J. A. Revelli, C. E. Budde, D. Prato, and H. S. Wio, “Bulk mediated surface diffusion: non markovian desorption with finite first moment,” *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, vol. 43, pp. 65–71, 2005.
- [71] C. A. Condat, “Defect diffusion and closed-time distributions for ionic channels in cell membranes,” *Phys. Rev. A*, vol. 39, pp. 2112–2125, Feb 1989.
- [72] H. Sano and M. Tachiya, “Partially diffusion-controlled recombination,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 71, no. 3, pp. 1276–1282, 1979.
- [73] M. O. Cáceres, C. E. Budde, and M. A. Ré, “Theory of the absorption probability density of diffusing particles in the presence of a dynamic trap,” *Phys. Rev. E*, vol. 52, pp. 3462–3468, Oct 1995.
- [74] S. Redner, *A Guide to First-Passage Processes*. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2001.
- [75] M. Tachiya, “On the multi-step tunneling model for electron scavenging in low-temperature glasses,” *Radiation Physics and Chemistry (1977)*, vol. 17, no. 6, pp. 447 – 456, 1981.
- [76] S. B. Yuste, “Escape times of j random walkers from a fractal labyrinth,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 79, pp. 3565–3568, Nov 1997.
- [77] W. Feller, *An Introduction to Probability Theory and Its Applications, Vol. 1*. New York: John Wiley & Sons, 1968.
- [78] K. Lindenberg, V. Seshadri, K. E. Shuler, and G. H. Weiss, “Lattice random walks for sets of random walkers. first passage times,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 23, pp. 11–25, 1980. 10.1007/BF01014427.
- [79] M. Tachiya, “Theory of diffusion-controlled reactions: Formulation of the bulk reaction rate in terms of the pair probability,” *Radiation Physics and Chemistry (1977)*, vol. 21, no. 1-2, pp. 167 – 175, 1983.
- [80] C. A. Condat, “Target relaxation by walkers departing from a finite domain,” *Phys. Rev. A*, vol. 41, pp. 3365–3368, Mar 1990.
- [81] M. F. Shlesinger, “Electron scavenging in glasses,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 70, no. 11, pp. 4813–4818, 1979.

- [82] N. S. Goel and N. Richter-Dyn, *Stochastic Models in Biology*. New York: Academic Press, 1974.
- [83] M. B. Monagan, K. O. Geddes, K. M. Heal, G. Labahn, S. M. Vorkoetter, J. McCarron, and P. DeMarco, *Maple 10 Programming Guide*. Waterloo ON, Canada: Maplesoft, 2005.
- [84] J. L. Spouge, “Exact solutions for a diffusion-reaction process in one dimension,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 60, pp. 871–874, Mar 1988.
- [85] E. W. Montroll and G. H. Weiss, “Random walks on lattices. ii,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 6, no. 2, pp. 167–181, 1965.
- [86] H. Taitelbaum, R. Kopelman, G. H. Weiss, and S. Havlin, “Statistical properties of nearest-neighbor distances at an imperfect trap,” *Phys. Rev. A*, vol. 41, pp. 3116–3120, Mar 1990.
- [87] A. V. Barzykin and M. Tachiya, “Diffusion-influenced reaction kinetics on fractal structures,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 99, no. 12, pp. 9591–9597, 1993.
- [88] M. Moreau, G. Oshanin, and O. Bénichou, “Dynamical disorder in diffusion-limited reactions,” *Physica A*, vol. 306, pp. 169 – 179, 2002.
- [89] E. W. Montroll *Proc. Symp. Appl. Math.*, vol. 16, p. 193, 1964.
- [90] H. Berg and E. Purcell, “Physics of chemoreception,” *Biophysical*, vol. 20, no. 2, pp. 193–219, 1977.
- [91] O. G. Berg, R. B. Winter, and P. H. Von Hippel, “Diffusion-driven mechanisms of protein translocation on nucleic acids. 1. models and theory,” *Biochemistry*, vol. 20, no. 24, pp. 6929–6948, 1981.
- [92] J. Linderman and D. Lauffenburger, “Analysis of intracellular receptor/ligand sorting. calculation of mean surface and bulk diffusion times within a sphere,” *Biophysical*, vol. 50, no. 2, pp. 295–305, 1986.
- [93] H.-X. Zhou and R. Zwanzig, “A rate process with an entropy barrier,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 94, no. 9, pp. 6147–6152, 1991.
- [94] I. V. Grigoriev, Y. A. Makhnovskii, A. M. Berezhkovskii, and V. Y. Zitserman, “Kinetics of escape through a small hole,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 116, no. 22, pp. 9574–9577, 2002.
- [95] A. Singer, Z. Schuss, D. Holcman, and R. Eisenberg, “Narrow escape, part i,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 122, pp. 437–463, 2006.
- [96] A. Singer, Z. Schuss, and D. Holcman, “Narrow escape, part ii: The circular disk,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 122, pp. 465–489, 2006.

- [97] A. Singer and Z. Schuss, “Activation through a narrow opening,” *Phys. Rev. E*, vol. 74, p. 020103, Aug 2006.
- [98] P. C. Bressloff and B. A. Earnshaw, “Diffusion-trapping model of receptor trafficking in dendrites,” *Phys. Rev. E*, vol. 75, p. 041915, Apr 2007.
- [99] O. Bénichou and R. Voituriez, “Narrow-escape time problem: Time needed for a particle to exit a confining domain through a small window,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 100, p. 168105, Apr 2008.
- [100] G. Oshanin, M. Tamm, and O. Vasilyev, “Narrow-escape times for diffusion in microdomains with a particle-surface affinity: Mean-field results,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 132, no. 23, p. 235101, 2010.
- [101] O. Bénichou, D. Grebenkov, P. Levitz, C. Loverdo, and R. Voituriez, “Optimal reaction time for surface-mediated diffusion,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 105, p. 150606, Oct 2010.
- [102] O. Bénichou, D. Grebenkov, P. Levitz, C. Loverdo, and R. Voituriez, “Mean first-passage time of surface-mediated diffusion in spherical domains,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 142, pp. 657–685, 2011.
- [103] D. Holcman and Z. Schuss, “Escape through a small opening: Receptor trafficking in a synaptic membrane,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 117, pp. 975–1014, 2004.
- [104] J. A. Revelli, C. E. Budde, and H. S. Wio, “Bulk-mediated surface diffusion: return probability in an infinite system,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 19, no. 6, p. 065127, 2007.
- [105] C. Budde, *Tesis Doctoral: Aplicaciones de Caminatas Aleatorias con Estados Inter-nos*. Fa.M.A.F., Universidad Nacional de Córdoba, 1995.
- [106] F. J. Dyson, “The Radiation Theories of Tomonaga, Schwinger, and Feynman,” *Phys. Rev.*, vol. 75, pp. 486–502, Feb 1949.

