ISSN (EN LINEA): 1850 - 1158

El problema de la primera transición

The first transition problem

Miguel A. Ré

Facultad de Matemática, Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba
Ciudad Universitaria - (5000) - Córdoba - Argentina
e-mail: re@alerce.fis.uncor.edu

La densidad de tiempo de pausa entre eventos es una magnitud central en la teoría de las caminatas aleatorias de tiempo continuo. Sin embargo esta densidad de probabilidad en general no describe correctamente la distribución de tiempos hasta la primera transición. Distintos autores en diversos contextos han abordado el problema de la primera transición, que puede plantearse de la siguiente manera: dado que en general la elección del instante $t = 0$ no coincidirá con la llegada del caminante a la posición inicial, ¿cuál es la densidad de probabilidad para el tiempo de la primera transición? En la presente comunicación se analiza este problema para una densidad de tiempo de pausa del tipo Erlang. El análisis se efectúa en el contexto del problema del atrapamiento dinámico para calcular la densidad de probabilidad de la primera transición luego de cada visita del caminante a la trampa. También se consideran otras situaciones y se reobtiene el resultado de Feller para el proceso "on going" para esta familia de funciones.

The waiting time density is a central magnitude in the Continuous Time Random Walk theory. Nevertheless, in general, this probability density does not give the right time distribution for the first transiton. Different authors in various situations have tackled this problem, which can be stated in the following way: given that the choice of time $t = 0$ in general will not coincide with a transition of the walker, which is the right probability density for the first transition time?. In this communication the problem is studied for an Erlang waiting time density. This study is made with the dynamic trapping problem in mind. The probability density for the first transition must be calculated in each visit of the walker to the trapping site. There are considered other situations and Feller's result for the on going process is retrieved for this familiy of functions.

Pacs N^0 05.40+j

1 Introducción

La teoría de caminatas aleatorias de tiempo continuo (CTRW) con una densidad de tiempo de pausa (WTD) general introducida por Montroll y Weiss(1) ha encontrado un sinnúmero de aplicaciones en la formulación de modelos para la explicación de diversos fenómenos en las áreas de la física, la química o la biología. Una recopilación de parte de la extensa bibliografía publicada sobre este tema puede encontrarse por ejemplo en(2) o en(3).

La WTD, $\psi(t)$, es la densidad de probabilidad para el tiempo entre transiciones definida de la siguiente manera: supongamos que la última transición de la partícula en el CTRW se dió en el instante t', entonces $\psi\left(t - t'\right) dt$ es la probabilidad de que la siguiente transición ocurra entre t y $t + dt$. La descripción de la CTRW debe completarse dando la densidad de probabilidad para el tiempo del primer salto o transición. La necesidad de incluir esta densidad puede considerarse a partir del planteo en(2): la elección del instante $t = 0$ es arbitraria y en general no coincidirá con el instante de una transición. Dado que $\psi(t)$ es la densidad de probabilidad para el tiempo entre transiciones, la misma no dará la distribución para el tiempo de la primera transición salvo en el caso particular en que $t = 0$ coincide con una transición. Una excepción a lo aquí expresado lo constituye el proceso con WTD exponencial, en cuyo caso la WTD para la primera transición coincide con la función general, como ha sido discutido en(4) o en(5).

Distintos autores han considerado el problema de la densidad de probabilidad para el el tiempo de la primera transición en diversos contextos. En un artículo sobre el tema, Prato y Pury(6) mencionan el conocido factor 2 extra del cálculo de Drude para la ley de Wiedeman Franz o la controversia planteada por la objeción de Tunaley(7) al modelo de conductividad propuesto por Sher y Lax(8) para sólidos amorfos y la consiguiente respuesta(9). Esta última discusión se ha mantenido y es uno de los ejemplos clásicos que ilustran la importancia de una correcta definición de la WTD para la primer transición.

Haus y Kehr[2] han señalado que la densidad para el tiempo de la primera transición debe reflejar las condiciones iniciales del problema. Este aspecto también ha sido desarrollado por Papoulis[4] en el contexto del problema de la confiabilidad de sistemas o en[5] para modelos de reacción mediados por difusión.

En esta comunicación revisitamos el problema de la primera transición en el contexto del atrapamiento dinámico o atrapamiento con dinámica de habilitación en modelos de reacción controlados por difusión[10,11]. Una magnitud central en el atrapamiento dinámico es la densidad de probabilidad para el tiempo de atrapamiento, $A_{i_0}(s_0;t)$, de una partícula que comienza su CTRW sobre una red en la posición s_0, por una trampa ubicada en la posición s_1. La trampa en s_1 puede encontrarse en uno de dos estados posibles con distintas propiedades de atrapamiento en cada uno de ellos. Para mayores detalles acerca del atrapamiento dinámico puede consultarse una comunicación anterior[12] donde se ha propuesto un método para el cálculo de $A_{i_0}(s_0;t)$, basado en la resolución de la relación de recurrencia que debe satisfacer la densidad de probabilidad para el tiempo de la ν-ésima visita

$$\begin{aligned}
&F_{i,i_0}^{(\nu)}\left(\vec{s}_1,\vec{s}_0;t\right) = \\
&\int_0^t dt' \sum_j P_{ij}\left(t,t'\right) \sum_{\vec{s}'} F^G\left(\vec{s}_1,\vec{s}';t-t'\right) \times \\
&\times \int_0^{t'} dt''\psi\left(\vec{s}',\vec{s}_1;t'-t''\right) \sum_{j_0} C_{jj_0}\left(t',t''\right) \times \\
&\times F_{j_0,i_0}^{(\nu-1)}\left(\vec{s}_1,\vec{s}_0;t''\right)
\end{aligned} \tag{1}$$

En esta ecuación $P_{ij}\left(t,t'\right)$ es la probabilidad de encontrar la trampa con estado i al tiempo t supuesto el estado j en el instante t', en tanto que $C_{jj_0}\left(t',t''\right)$ es la probabilidad condicional de encontrar la trampa con estado j al tiempo t', suponiendo que el caminante ha llegado a s_1 en el instante t'' sin que el caminante haya sido atrapado, condicionado a que el caminante no ha abandonado la posición s_1. Por otra parte F^G corresponde a la densidad de probabilidad para el tiempo del primer pasaje y ψ a la WTD de la CTRW equivalente sin trampas. Para mayores detalles puede consultarse[12]. El problema de la primera transición aparece en este contexto porque los tiempos en consideración en la relación de recurrencia corresponden a transiciones del caminante: en t'' el caminante arriba al sitio s_1 en su visita $\nu-1$, en t' abandona esta posición a la cual regresa en t para efectuar la ν-ésima visita. Los instantes de tiempo en que ocurren las transiciones en el proceso dicotómico que regula los estados de la trampa no coincidirán por supuesto con los instantes señalados, por lo que en cada visita al sitio s_1 se reitera el problema del cálculo de la densidad de probabilidad para el tiempo de la primera transición, necesarios para el cálculo de C_{jj_0} y P_{ij}. En[12] se supuso una dinámica markoviana de primer orden para las transiciones del proceso dicotómico, en cuyo caso la primera transición coincide con las restantes, como ya fuera señalado.

En esta comunicación consideramos el problema de la primera transición con el modelo de atrapamiento dinámico como marco de referencia para una dinámica de habilitación regulada por densidades de probabilidad de Erlang definidas por

$$E_n(t;\mu) = \frac{\mu^n t^{n-1}}{(n-1)!}e^{-\mu t} \tag{2}$$

con n un número entero y $n/\mu = \langle t\rangle$ el tiempo medio entre transiciones. La densidad de Erlang puede interpretarse como la densidad de probabilidad para la suma de n variables aleatorias independientes idénticamente distribuídas con una densidad de probabilidad exponencial con parámetro μ. En particular para el caso $n=1$ la densidad es una función exponencial, correspondiente a un proceso markoviano.

2 El proceso dicotómico con dinámica de Erlang

Consideramos en esta sección la determinación de la denasidad de probabilidad para el tiempo de la primera transición en un proceso dicotómico con WTD dada por funciones Erlang en cada estado. Asociamos el proceso dicotómico a la dinámica que regula los cambios de estado de la trampa en el proceso de atrapamiento dinámico. Las funciones de Erlang pueden expresarse como un producto de convolución de funciones exponenciales

$$E_n(t;\mu) = \left[\mu e^{-\mu t}\star\right]^n \tag{3}$$

donde hemos denotado por el símbolo $\star$ el producto de convolución entre las funciones

$$\left[\psi(t)\star\phi(t)\right] = \int_0^t dt'\,\psi\left(t-t'\right)\phi\left(t'\right) \tag{4}$$

Esta propiedad permite considerar un proceso dicotómico regulado por una dinámica de Erlang de índice n como un proceso embebido en un proceso markoviano de n estados[3,13].

Consideremos una CTRW sobre un anillo con n posiciones o estados y la posibilidad de avanzar en un único sentido ($j\to j+1$) regulada por la densidad de probabilidad para el tiempo entre transiciones

$$f_j(t) = \mu_j e^{-\mu_j t} \tag{5}$$

de manera tal que si el caminante ha llegado a la posición j en $t=0$ la probabilidad de efectuar la transición $j\to j+1$ entre t y $t+dt$ es $f_j(t)\,dt$. Para la CTRW sobre el anillo identificaremos todo sitio $j>n$

con el sitio $j \bmod n$, de manera que los valores de j estén comprendidos entre 1 y n.

Definimos la densidad de probabilidad para el tiempo de arribo a la posición i para un caminante que arrancó en la posición i_0, $R_{i,i_0}(t)$, de manera tal que la probabilidad de que se produzca un arribo al sitio i entre t y $t+dt$ (no necesariamente el primero) será $R_{i,i_0}(t)\,dt$. Esta densidad de probabilidad deberá cumplir con la relación de recurrencia[2]

$$R_{i,i_0}(t) = f_{i-1}(t) \star R_{i-1,i_0}(t) + f_{i_0}(t)\,\delta_{i-1,i_0} \qquad (6)$$

La llegada a la posición i se producirá por una transición desde la posición $i-1$, a la que el caminante habrá llegado en un instante anterior a t. El segundo término suma la contribución de las realizaciones en las que el caminante comienza su RW en $i-1\ (=i_0)$ y efectúa su primera transición al tiempo t. Notamos que al asumir la dinámica (5) para la WTD en las posiciones del anillo, la densidad de probabilidad para el tiempo de la primer transición será coincidente con la WTD, como queda expresado en el segundo término. Esta ecuación puede resolverse en la representación de Laplace obteniéndose

$$R_{i,i_0}(u) = [I - F(u)]^{-1}_{i,i_0+1}\, f_{i_0}(u) \qquad (7)$$

donde $F(u)$ representa la matriz de las funciones de transición en la representación de Laplace: $[F(u)]_{i,j} = f_j(u)\,\delta_{i,j+1}$. De aquí en más representamos la transformada de Laplace de una función por la sustitución del argumento $t \to u$: $g(u) = \int_0^\infty dt\, \exp(-ut)\, g(t)$. Es posible obtener una forma explícita para la matriz inversa dada la estructura simple de la matriz F

$$[I - F(u)]^{-1}_{i\,j} = \begin{cases} \dfrac{1}{1-f_N} \prod_{l=j}^{i-1} f_l(u) & i \neq j \\ \dfrac{1}{1-f_N} & i = j \end{cases} \qquad (8)$$

donde hemos definido $f_N = \prod_{j=1}^{n} f_j(u)$ y deben usarse además las condiciones periódicas de contorno sobre el anillo para el cálculo de los productos. Así por ejemplo

$$\prod_{j=5}^{3} f_j(u) = \prod_{j=5}^{n} f_j(u) \prod_{j=1}^{3} f_j(u) \qquad (9)$$

La probabilidad para la posición del caminante en el anillo al tiempo t se obtiene mediante la relación

$$P_i(t) = \Phi_i(t) \star \sum_{i_0} R_{i,i_0}(t)\, g_{i_0} + \Phi_i(t)\, g_{i_0} \delta_{i,i_0} \qquad (10)$$

donde g_{i_0} corresponde a la distribución inicial de probabilidad (en $t=0$) para la posición del caminante en el anillo y $\Phi_i(t) = 1 - \int_0^t dt'\, f_i\left(t'\right) = \exp(-\mu_i t)$ la probabilidad de permanecer un tiempo t en el sitio i (*sojourn probability*). El primer término corresponde a la contribución de las realizaciones en las que el caminante llega a la posición i en algún instante anterior a t y permanece allí hasta el tiempo t, en tanto que el segundo a la de aquellas realizaciones en las que la posición inicial del caminante es la de observación y no se ha desplazado de la misma en el intervalo $[0,t]$.

Podemos considerar el proceso dicotómico con dinámica de Erlang que regula los cambios de estado de la trampa como un caso particular del problema de la CTRW a lo largo del anillo. Consideramos así dos conjuntos de estados en el anillo: los primeros n_1 (estados 1 a n_1) con frecuencia de transiciones al estado siguiente μ_1, en tanto que los restantes n_2 (estados n_1+1 a n_1+n_2) tienen una frecuencia de transición al estado siguiente μ_2. El número total de estados es $n_1+n_2=n$. Al primer conjunto de estados lo denominaremos a, de manera tal que la probabilidad de encontrar al caminante en el estado a será la probabilidad marginal

$$P_a(t) = \sum_{i=1}^{n_1} P_i(t) \qquad (11)$$

y similarmente para el segundo conjunto, que denominaremos d

$$P_d(t) = \sum_{i=n_1+1}^{n} P_i(t) \qquad (12)$$

El arribo de un caminante al estado a está asociado a la transición $n \to 1$, en tanto que el arribo al estado d a la transición $n_1 \to n_1+1$. Consideramos ahora la determinación de la densidad de probabilidad para el tiempo t transcurrido entre ambas transiciones, correspondiente a la WTD del proceso dicotómico. En este intervalo de tiempo el caminante deberá recorrer los estados intermedios, siendo (5) la densidad de probabilidad para el tiempo de transición entre los estados intermedios. La densidad de probabilidad para el tiempo t está dada así por el producto de convolucin de (5), resultando $E_{n_1}(t;\mu_1)$, de acuerdo a (3). De forma similar la WTD para la transición $d \to a$ resulta $E_{n_2}(t;\mu_2)$. El esquema puede generalizarse a más estados de una manera directa, pero en esta comunicación nos restringiremos a sólo dos estados posibles para la trampa.

El cálculo de la probabilidad para el estado del proceso dicotómico al tiempo t seguirá un lineamiento similar al ya empleado en el caso del anillo. Sin embargo, dado que la dinámica de transiciones no es exponencial en este caso, deberá distinguirse la WTD para la primera transición en la ecuación (7), resultando en este caso la densidad de probabilidad para el tiempo de arribo al estado α para un proceso que comienza en el estado β

$$R_{\alpha\,\beta}(u) = \begin{bmatrix} \frac{E_2(u;\mu_2)h_a(u)}{1-f_N} & \frac{h_d(u)}{1-f_N} \\ \frac{h_a(u)}{1-f_N} & \frac{E_1(u;\mu_1)h_d(u)}{1-f_N} \end{bmatrix} \qquad (13)$$

en la representación de Laplace. Los índices α y β pueden tomar los valores a o d y $h_\alpha(t)$ es la densidad de probabilidad para la primera transición comenzando en el estado α.

Denotamos por $\Psi_\alpha(t) = 1 - \int_0^t dt'\, E_{n_\alpha}\left(t'; \mu_\alpha\right)$ a la probabilidad de permanencia en un estado del dicotómico un tiempo t y por $H_\alpha(t) = 1 - \int_0^t dt'\, h_\alpha\left(t'\right)$ a la probabilidad de que la primera transición no se produzca antes del tiempo t. La probabilidad para el estado α al tiempo t quedará expresada por

$$P_\alpha(t) = \Psi_\alpha(t) \star \sum_\beta R_{\alpha,\beta}(t)\, g_\beta + H_\alpha(t)\, \delta_{\alpha,\beta} g_\beta \quad (14)$$

donde g_β es la distribución inicial de probabilidad en los estados del proceso dicotómico. De manera similar a lo discutido para la ecuación (10) el primer término da la contribución de las realizaciones en las que el caminante alcanza el estado α un tiempo anterior a t y permanece en dicho estado hasta el tiempo t, en tanto que el segundo término es la contribución de las realizaciones en las que el caminante inicialmente ocupa el estado α y no hay transiciones hasta el tiempo en consideración. Nótese en este caso que debe usarse la probabilidad de permanencia para la primer transición en el segundo término.

De igualar los resultados de las ecuaciones (11) y (14) encontramos la expresión para la densidad de probabilidad para el tiempo de la primera transición en la representación de Laplace

$$\begin{aligned} h_a(u) &= \sum_{j=1}^{n_1} e_j \left[\frac{\mu_1}{\mu_1 + u}\right]^{n_1 - j + 1} \\ h_d(u) &= \sum_{j=1}^{n_2} e_{n_1 + j} \left[\frac{\mu_2}{\mu_2 + u}\right]^{n_2 - j + 1} \end{aligned} \quad (15)$$

con e_i la población relativa del subestado i en $t = 0$: $e_i = g_i / g_{a(d)}$ para $i \leq (>) n_1$, donde $g_a = \sum_{i=1}^{n_1} g_i$ y similarmente para g_d. Para el caso bajo consideración la distribución inicial en subestados es equivalente a dar la condición inicial para la CTRW, como se discute a continuación.

3 Algunos resultados conocidos

Comparamos en este punto el resultado obtenido en la expresión (15) para la densidad de probabilidad para el tiempo de la primer transición con los obtenidos por otros autores en algunas situaciones particulares.

3.1 El resultado de Feller

Consideramos aquí el resultado de Feller[14] para la densidad de probabilidad para el tiempo de la siguiente transición para el proceso "on going". Se supone aquí que a $t = 0$ la distribución de probabilidad ha alcanzado el estado de equilibrio y que la densidad de probabilidad para la primera transición mantiene esta condición. Para el proceso dicotómico con dinámica de Erlang bajo consideración, el resultado de Feller puede expresarse de la siguiente manera (vease por ejemplo[2])

$$h_\alpha(t) = \frac{\mu_\alpha}{n_\alpha} \Psi_\alpha(t) \quad (16)$$

Consideremos ahora la expresión propuesta en la ecuación (15), bajo la condición de equilibrio en la distribución de estados del proceso subyacente, dada por

$$g_i = \begin{cases} \frac{\mu_2}{n_2\mu_1 + n_1\mu_2} & 1 \leq i \leq n_1 \\ \frac{\mu_1}{n_2\mu_1 + n_1\mu_2} & n_1 + 1 \leq i \leq n \end{cases} \quad (17)$$

Sustituyendo estos valores en la expresión (15) obtenemos para este caso, en la representación de Laplace,

$$h_a(u) = \frac{\mu_1}{n_1} \frac{1 - \left(\frac{\mu_1}{\mu_1 + u}\right)^{n_1}}{u} \quad (18)$$

y similarmente para h_d. Notamos que la transformada de Laplace de las funciones Erlang es

$$E_{n_1}(u; \mu_1) = \left(\frac{\mu_1}{u + \mu_1}\right)^{n_1} \quad (19)$$

y de la función Ψ_α

$$\Psi_\alpha(u) = \frac{1}{u}\left[1 - E_{n_1}(u; n_1)\right] \quad (20)$$

y por lo tanto (16) y (18) son coincidentes.

3.2 Tiempo transcurrido desde la última transición

En su respuesta a la objeción planteada por Tunaley[7], Lax y Sher[9], proponen la siguiente expresión para la densidad de probabilidad para el tiempo de la primera transición, suponiendo que ha transcurrido un tiempo τ desde la última transición previa a $t = 0$

$$h_a(t) = \frac{E_{n_1}(t + \tau; \mu_1)}{\Psi_a(\tau)} \quad (21)$$

y similarmente para el estado d.

Para el proceso subyacente la condición impuesta equivale a suponer que un tiempo τ antes del instante $t = 0$ se alcanzó el subestado 1 (en el caso del estado a) y hasta el instante $t = 0$ no se ha producido la transición $n_1 \to n_1 + 1$. Bajo esta suposición la distribución en los estados del anillo estará dada por la probabilidad de llegar al estado interno i $(1 \leq i \leq n_1)$ partiendo desde el estado 1 y permanecer en dicho estado i hasta $t = 0$, dada por

$$g_i = \Phi_i(\tau) \star E_{i-1}(\tau; \mu_1) \quad (22)$$

a partir de la cual calculamos la población relativa e_i de los estados 1 a n_1 cuando ha transcurrido un tiempo τ desde la llegada al estado 1. Resolviendo el producto de convolución obtenemos

$$e_i(\tau) = \frac{1}{\mu_1} \frac{E_{i-1}(\tau; \mu_1)}{\Psi_\alpha(\tau)} \quad (23)$$

Sustituímos la expresión para la distribución relativa en (15) y pasamos la expresión a la representación temporal

$$h_a(t) = \sum_{j=2}^{n_1} E_{n_1-j+1}(t;\mu_1)\frac{1}{\mu_1}\frac{E_{j-1}(\tau;\mu_1)}{\Psi_\alpha(\tau)} + \frac{E_{n_1}(t;\mu_1)}{\Psi_\alpha(\tau)} \tag{24}$$

Usando ahora la forma explícita de las funciones Erlang un cálculo directo muestra la identidad de los resultados (21) y (24.

3.3 El problema del tiempo de espera

Un planteo alternativo para el cálculo de la densidad de probabilidad para el tiempo de la primera transición fue dado por Prato y Pury [6], enunciando el problema de la siguiente manera: el tiempo entre arribo de colectivos a una parada está regulado por una estadística particular conocida. Se busca determinar la densidad de probabilidad para el tiempo de espera hasta el próximo colectivo, Δ, para un pasajero que llega a la parada en un instante de tiempo t después del paso de un colectivo, no necesariamente el último. Nótese la diferencia con el planteo de Lax y Sher discutido en el punto anterior, donde se ha considerado el tiempo transcurrido desde el paso del último colectivo. Suponiendo que en el intervalo de tiempo t han pasado n colectivos, el resultado obtenido en [6] es

$$h(\Delta \mid t; n) = \alpha e^{-\alpha n(t+\Delta)} \sum_{j=0}^{n-1}\sum_{k=0}^{n-1} \frac{(\alpha n\Delta)^k}{k!} r_j^{k+1} e^{\alpha n t r_j} \tag{25}$$

para una WTD entre el paso de colectivos

$$\psi_n(t;\alpha) = \frac{\alpha n}{(n-1)!}(\alpha n t)^{n-1} e^{-\alpha n t} \tag{26}$$

que coincide con la densidad de Erlang si identificamos $n\alpha = \mu$. Aquí $r_j = \exp\left(i\frac{2\pi}{n}j\right)$ con $j = 0,\ldots,n-1$ representa las raíces n-ésimas de la unidad.

Consideramos ahora este problema con la propuesta de la ecuación (15). En este caso suponemos un único conjunto de estados: la densidad de probabilidad para el tiempo de transición entre posiciones del anillo será $f_j = \mu \exp(-\mu t)\ \forall j$ y el pasaje de un colectivo se identifica con el arribo del sistema al estado 1. La probabilidad para el estado interno j al tiempo t, suponiendo una transición al estado 1 en $t = 0$, se obtiene sustituyendo $g_{i_0} = \delta_{i_0,1}$ en (10). En la representación de Laplace resulta

$$P_{j\,1}(u) = \frac{1}{u+\mu}\frac{\left(\dfrac{\mu}{u+\mu}\right)^{j-1}}{1-\left(\dfrac{\mu}{u+\mu}\right)^{n}} \tag{27}$$

un cociente de polinomios, que permite un cálculo directo de la antitransformada de Laplace (véase por ejemplo [15]). La distribución en estados internos, luego de un tiempo t del paso de un colectivo resulta por lo tanto

$$g_j(t) = \frac{1}{n}\sum_{l=0}^{n-1}\frac{1}{r_l^{j-1}} e^{\mu_1(r_l-1)t} \tag{28}$$

recordando que r_l representa la l-ésima raíz n-ésima de la unidad.

Sustituyendo en la ecuación (15) obtenemos

$$h(u \mid t) = \sum_{j=1}^{n} g_j \left(\frac{\mu}{\mu+u}\right)^{n-j+1} \tag{29}$$

y antitransformando en Laplace

$$h(\Delta \mid t) = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n-1} E_{n-j+1}(t+\delta;\mu)\sum_{l=0}^{n-1} r_l^j e^{\mu r_l t} e^{-\mu t} \tag{30}$$

coincidente con el resultado de Prato y Pury identificando $n\alpha = \mu$, como ya fuera mencionado.

Vemos así que nuestra expresión (15) nos permite reobtener otros resultados presentes en la literatura. En la próxima sección aplicamos el formalismo al cálculo en el problema del atrapamiento dinámico.

4 El atrapamiento dinámico

Volvemos en esta sección a la relación de recurrencia (1) que satisface la densidad de probabilidad para el tiempo de la ν-ésima visita al sitio s_1 a fin de considerar la aplicación del método propuesto para el cálculo de la densidad de probabilidad para el tiempo de la primer transición. A fin de ilustrar la aplicación del método consideramos aquí un caso de atrapamiento particularmente simple: en el estado a el caminante es atrapado inmediatamente en la posición s_1. Esto significa que si el caminante llega a s_1 con la trampa en estado a o la trampa adquiere el estado a mientras el caminante ocupa la posición s_1 el atrapamiento se produce inmediatamente sin posibilidad de escape. En el estado d la trampa se desactiva y es un sitio regular de red. La ecuación (1) en este caso adopta la forma particular

$$\begin{aligned} F^{(\nu)}_{\alpha,\alpha_0}(s_1,s_0;t) = & \sum_{s'}\left[P_{\alpha,d}(t)\,F^G\left(s_1,s';t\right)\right]\star \\ & \star\left[\psi\left(s',s_1;t\right)H_d(t)\right] \\ & \star F^{(\nu-1)}_{d,\alpha_0}(s_1,s_0;t) \end{aligned} \tag{31}$$

ya que sólo dan lugar a una nueva visita (la visita ν) aquellas realizaciones en las que la trampa permanece inactiva durante todo el tiempo de permanencia en s_1 (durante la visita $\nu-1$), reflejado por la probabilidad $H_d\left(t'_{n-1}-t_{n-1}\right)$. Vamos a suponer además $\alpha_0 = d$ y $s_0 \neq s_1$. Una vez completado el cálculo las extensiones a otras condiciones iniciales resultarán directas. Elegimos un método constructivo comenzando por el cálculo de la densidad de probabilidad para el tiempo de la primer visita, concentrándonos en el estado inactivo d y considerando a continuación las siguientes visitas. Tenemos así para la primer visita

$$F_{d,d}^{(1)}(s_1, s_0; t_1) = P_{d,d}(t_1) F(s_1, s_0; t_1) \qquad (32)$$

y para calcular $P_{d,d}$ debemos determinar la densidad para el tiempo de la primer transición a partir de (15) considerando las condiciones iniciales del problema, expresada como una distribución inicial en subestados g_{i_0} ($\neq 0$ para $n_1 + 1 \leq i_0 \leq n_1 + n_2$ ya que hemos supuesto que sólo los estados inactivos están ocupados inicialmente) y $g_d = \sum_{i_0=n_1+1}^{n} g_{i_0}$. Sustituyendo en la ecuación (15) y ésta a su vez en (14) encontramos

$$P_{d,d}(u) = \sum_{j,m=n_1+1}^{n} P_{m,j}(u) g_j \qquad (33)$$

en la representación de Laplace, donde $P_{i,j}(u)$ es la transformada de Laplace de la probabilidad para el proceso embebido. Similarmente podemos encontrar una expresión para $P_{a,d}(u)$. Antitransformando en Laplace (33) obtenemos $P_{d,d}(t_1)$.

Pasamos a calcular ahora la densidad $F_{d,d}^{(2)}(s_1, s_0; t)$ usando la relación de recurrencia (31). En primer lugar determinamos $H_d(t)$ que en la representación de Laplace resulta

$$H_d(u) = \frac{1}{u}\left[1 - h_d(u)\right] \qquad (34)$$

donde ahora debemos sustituir en la expresión (15) la distribución en estados internos al tiempo t_1, dado por $P_i(t_1)$ como fue calculado en (33). Obtenemos así

$$H_d(u) = \sum_{m=n_1+1}^{n} \sum_{j=n_1+1}^{m} C_{m,j}(u) \frac{P_j(t_1)}{P_d(t_1)} \qquad (35)$$

donde la matriz

$$C_{i,j}(u) = \Phi_2(u) \left[f_2(u)\right]^{i-j} \qquad (36)$$

es la transformada de Laplace, de la probabilidad $C_{i,j}\left(t_1^{'} - t_1\right)$ de que la trampa esté con estado interno i al tiempo $t_1^{'}$ suponiendo que en t_1 se encontraba en el estado interno j y sin haber pasado por los estados activos. A continuación debemos calcular $P_{d,d}\left(t_2 - t_1^{'}\right)$. Nuevamente usamos $h_d(u)$ como definida en (15), pero en este caso con la distribución en estados internos dada por $C_i\left(t_1^{'}\right)$. El cálculo es similar al ya efectuado para obtener (33) con la sustitución mencionada. Reemplazando en (31) obtenemos finalmente

$$\begin{aligned} F_{d,d}^{(2)}(s_1, s_0; t,) = &\int_0^{t_2} dt_1 \sum_{j,m,i_0=n_1+1}^{n} D_{m,j}(t_2 - t_1) \times \\ &\times F_{j,i_0}^{(1)}(s_1, s_0; t_1) g_{i_0} \end{aligned} \qquad (37)$$

donde hemos denotado por

$$F_{i,j}^{(1)}(s_1, s_0; t) = P_{i,j}(t) F(s_1, s_0; t)$$

y

$$\begin{aligned} D_{i,l}(t) = &\sum\nolimits_{s^{'};j=n_1+1}^{n} \left[P_{i,j}(t) F^G\left(s_1, s^{'}; t\right)\right] \star \\ &\star \left[\psi\left(s^{'}, s_1; t\right) C_{j,l}(t)\right] \end{aligned} \qquad (38)$$

El procedimiento que hemos seguido hasta aquí puede generalizarse a considerar las siguientes visitas a la posición s_1, obteniéndose en general

$$F_{d,d}^{(\nu)}(s_1, s_0; t) = \sum_{m,j=n_1+1}^{n} \left[D(t) \star\right]_{m,j}^{\nu-1} F_j^{(1)}(s_1, s_0; t) \qquad (39)$$

5 Conclusiones

Se ha presentado un método alternativo para el cálculo de la densidad de probabilidad para el tiempo de la primera transición en un proceso cuya dinámica de transiciones está regulada por densidades de probabilidad Erlang. Se ha hecho uso en particular de la propiedad de que estas funciones pueden expresarse como productos de convolución de funciones exponenciales. El cálculo propuesto se ha desarrollado con el problema del atrapamiento dinámico como marco de referencia. La condición inicial para el cálculo de la densidad para la primera transición se expresa como una distribución inicial en estados internos del proceso. Se han reobtenido otros resultados presentes en la literatura en el contexto de problemas diferentes. El método desarrollado permite resolver la relación de recurrencia para la densidad de probabilidad para el tiempo de la n-ésima visita al sitio trampa sin necesidad de recurrir a aproximaciones regenerativas. El cálculo toma en cuenta la pérdida de probabilidad para los estados internos de la trampa, ya que debe notarse que aún cuando la dinámica de las transiciones es independiente del proceso de difusión, la población en los estados internos se ve afectada por la pérdida de probabilidad que significa el atrapamiento. En base a los cálculos aquí presentados se está trabajando en la determinación de la densidad de probabilidad para el tiempo de atrapamiento y de la tasa de reacción y los resultados serán publicados pronto.

Agradecimientos: El autor agradece el financiamiento de Agencia Córdoba Ciencia y SeCyT-UNC para este proyecto.

Referencias

[1] E. W. Montroll y G. H. Weiss,"Random Walks on Lattices. II", J. Math. Phys. **6**, 167 (1965).

[2] J. W. Haus y K. W. Kehr, "Diffusion in Regular and Disordered Lattices", Phys. Rep. **150**, 261 (1987).

[3] G. H. Weiss, "Aspects and applications of the random walk", North Holland, Amsterdam (1994).

[4] A. Papoulis, "Probability, Random Variables and Stochastic Processes", McGraw Hill International, New York, 3^{a} edición, (1991).

[5] M. A. Ré y C. E. Budde, "Diffusion-Mediated Reactions with a Time-Dependent Absorption Rate", Phys. Rev. E **61**, 1110 (2000).

[6] D. P. Prato y P. A. Pury, "The Waiting Time Problem", Physica A **157**, 1261 (1989).

[7] J. K. E. Tunaley, "Theory of AC Conductivity Based on Random Walks", Phys. Rev. Lett. **33**, 1037 (1974).

[8] H. Sher y M. Lax, "Stochastic Transport ina Disordered Solid. I. Theory", Phys. Rev. B **7**, 4491 (1973).

[9] M. Lax y H. Sher, "Renewal Theory and AC Conductivity in Random Structures", Phys. Rev. Lett. **39**, 781 (1977).

[10] C. E. Budde, M. O. Cáceres y M. A. Ré, "Transient Behaviour in the Absorption Probability Distribution in the Presence of a Non-Markovian Dynamic Trap", Europhys. Lett. **32,** 205 (1995).
M. O. Cáceres, C. E. Budde y M. A. Ré, "Theory of the Absorption Probability Density of Diffusing Particles in the Presence of a Dynamic Trap", Phys. Rev. E **52,** 3462 (1995).
M. A. Ré, C. E. Budde y M. O. Cáceres, "Survival Probability in the Presence of a Dynamic Trap", Phys. Rev. E **54**, 4427 (1996).

[11] J. L. Spouge, A. Szabo y G. H. Weiss, "Single Particle Survival in Gated Trapping", Phys. Rev. E **54**, 2248 (1996).
J. L. Spouge, "Single Particle Survival in Parallel Gated Trapping"Phys. Rev. E **55**, 421 (1997).

[12] M. A. Ré y C. E. Budde, "Atrapamiento Multiestado de Tasa Finita Mediada por Difusin", Anales A.F.A. **15**, 26 (2004).

[13] N. G. van Kampen, "Stochastic processes in physics an chemistry", North Holland, Amsterdam (1981).

[14] W. Feller, "An Introduction to Probability Theory and Its Applications. Vol. 2", 2da. Ed., Wiley, New York, cap. 2, pp 92 (1965).

[15] M. R. Spiegel, "Transformadas de Laplace", serie Schaum, McGraw Hill, Mjico (1998).