

Propiedades estadísticas del proceso de reacción mediado por difusión para una trampa imperfecta móvil

Statistical properties of the diffusion mediated reaction process for a mobile imperfect trap

Natalia C. Bustos⁽¹⁾ y Miguel A. Ré^(1,2)

⁽¹⁾Facultad de Matemática, Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba
Ciudad Universitaria - (5010) - Córdoba - Argentina

⁽²⁾Facultad Regional Córdoba - Universidad Tecnológica Nacional.
Maestro López y Cruz Roja Argentina - (5010) - Córdoba - Argentina
e-mail: mre@cbasicas.frc.utn.edu.ar / re@famaf.unc.edu.ar

Recibido: 17/12/2012; Aceptado: 30/07/2013

El esquema de los procesos de reacción mediados por difusión resulta particularmente útil para la formulación de modelos en áreas de la Física, la Química, la Biología y recientemente la Ecología. En la formulación más frecuente de este esquema se supone la difusión de un conjunto de partículas, la especie mayoritaria que denominamos aquí A , en presencia de una trampa, la especie minoritaria que denominamos T , supuesta en una posición fija. Al encontrarse una partícula A con T pueden dar lugar a una reacción, en general con una probabilidad finita. En estos modelos se supone que el coeficiente de difusión de las partículas A es igual a la suma de los coeficientes de difusión de ambas especies.

Sin embargo existen procesos en los que el modelo con ambas especies en movimiento constituye una mejor aproximación. Se considera en esta comunicación un modelo de caminata aleatoria de tiempo continuo sobre una red unidimensional en la que ambas especies pueden desplazarse. Se supone una distribución inicial uniforme de la especie mayoritaria en presencia de una trampa, representando la especie minoritaria. Aún cuando el parámetro de red es el mismo para ambas especies, los coeficientes de difusión son diferentes, estando determinados por la tasa de saltos. La reacción no es inmediata en el encuentro de ambas especies, dando lugar a realizaciones en las que los reactivos pueden separarse sin reaccionar.

Se presentan resultados analíticos en el dominio de Laplace para la probabilidad de reacción, la tasa de reacción y la evolución de la concentración de la especie mayoritaria, analizándose las propiedades estadísticas de la distancia entre la trampa y el vecino más próximo.

Palabras Clave: Trampa móvil, difusión-reacción, Caminata Aleatoria, vecino más próximo

Diffusion mediated reaction schema has been particularly useful for modelling processes in Physics, Chemistry, Biology and recently in Ecology. Usually it is assumed the diffusion of walkers, the majority species designed here by A , in the presence of a trap designed here by T , the minority species, assumed in a fixed position in the lattice. When a walker reaches the trap position the reaction may take place with an in general finite probability. In these models it is assumed that the diffusion coefficient of the walkers is the sum of the diffusion coefficient of both species.

Nevertheless there are processes that are better described by both species diffusing. We present in this communication a Continuous Time Random Walk (CTRW) model on an one dimensional lattice in which both species diffuse with different diffusion coefficients. It is assumed an uniform initial distribution of the majority species in the presence of a trap, representing the minority species. Even when the lattice spacing is the same for both species, the diffusion coefficients are different since we assume different transitions rates. The reaction is not immediate when both species meet at a lattice site and there are realizations in which reactivities move apart without reacting.

Analytical results are presented in the Laplace domain for the reaction probability, reaction rate and majority species concentration.

Keywords: mobile trap, reaction-diffusion, Random Walk, nearest neighbor

Pacs N^o 05.40+j; 05.40.-d

1 Introducción

Decimos que una reacción $A + T \rightarrow B$ está controlada por difusión cuando el desplazamiento de una de las especies (o de ambas) es difusivo, siendo la difusión un

limitante de la reacción. La dinámica de los procesos de reacción mediados por difusión ha sido estudiada intensamente a lo largo de los años debido a su relevancia en diversos fenómenos en Física, Química, Biología o Ecología. Uno de los primeros modelos, ampliamente

difundido, formulado por Smoluchowski⁽¹⁾ asume que una de las especies se encuentra en una concentración muy diluida (suponemos T aquí), lo que permite asimilar el proceso de reacción a un proceso de captura de las partículas A (la especie mayoritaria), que difunden en presencia de una trampa en la posición de T . El cálculo de la tasa de reacción a partir de estos modelos se ha realizado bajo diversas simplificaciones tales como una dinámica exponencial para el proceso de atrapamiento o la suposición de que, aún cuando ambos tipos de partículas difunden, la trampa T está fija en tanto que las partículas A difunden isotrópicamente con un coeficiente de difusión $D = D_A + D_T$, siendo D_A y D_T los respectivos coeficientes de difusión de las especies A y T . La suposición de difusión relativa ha sido evaluada a partir de la extensión de los modelos más difundidos en el espacio continuo incluyendo la movilidad de ambas partículas^(2,3).

En esta comunicación se presenta un modelo para procesos de reacción mediados por difusión, basado en el esquema de Caminatas Aleatorias de Tiempo Continuo (CTRW) sobre una red unidimensional, asumiendo tasas de salto arbitrarias λ_A y λ_T para ambas especies. Se propone así una generalización del modelo de trampa imperfecta^(4,5) en redes asumiendo que la trampa T y los caminantes A son móviles. La extensión del modelo asume además una dinámica de reacción exponencial con tasa de reacción γ . En el límite $\gamma \rightarrow \infty$ se reobtiene la propuesta de Smoluchowski que supone reacción instantánea en el encuentro de ambas especies. La formulación del problema en redes permite además, como ha sido señalado por⁽⁶⁾, una mejor modelación del comportamiento a tiempos cortos para magnitudes como la tasa de reacción dependiente del tiempo.

En esta comunicación ampliamos el modelo propuesto en⁽⁷⁾ incluyendo sesgo en la difusión de las partículas A . Se calcula además la probabilidad para la distancia al vecino más próximo verificándose en forma analítica la equivalencia con el modelo de trampa fija y caminantes que difunden con un coeficiente de difusión suma de los coeficientes de ambas especies.

En la sección 2 resolvemos la CTRW de dos partículas no interactuantes que difunden sobre una red unidimensional, asimilable a un proceso difusivo anisotrópico en dos dimensiones. Los resultados que se obtienen en esta sección se utilizan para expresar los resultados en las demás secciones. En la sección 3 se presenta el proceso de reacción para un par $A-T$ calculándose la densidad de probabilidad para el tiempo de reacción del par. La evolución de un conjunto de partículas A en presencia de la trampa móvil se analiza en la sección 4. Se calcula la tasa de reacción dependiente del tiempo y la concentración de partículas A en función del tiempo para una distribución inicial de concentración uniforme. Finalmente en la sección 5 se describe la evolución del conjunto de partículas desde un sistema de referencia fijo a la trampa y se calcula la probabilidad para la distancia al vecino más próximo.

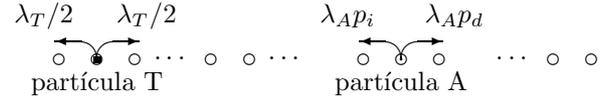


Figura 1: Esquema del modelo unidimensional formulado. La tasa de transiciones entre sitios para la partícula T es λ_T y para la partícula A es λ_A . La partícula T realiza una CTRW simétrica, en tanto que la partícula A una CTRW sesgada con probabilidad p_i de saltar a izquierda y probabilidad p_d de saltar a derecha ($p_i + p_d = 1$) en cada transición.

2 Caminata Aleatoria de dos partículas

Consideramos la Caminata Aleatoria de Tiempo Continuo (CTRW) de dos partículas distintas no interactuantes sobre una red unidimensional infinita. Identificamos las partículas como A y T respectivamente. Identificamos cada sitio de red por un número entero, denotando por x la posición que ocupa la partícula A en la red y por y la posición de la partícula T . Se ilustra esquemáticamente el problema enunciado en la figura 1. La partícula T realiza una CTRW simétrica sobre la red con una tasa de transiciones λ_T , de forma tal que la densidad de probabilidad para el tiempo de la transición $y' \rightarrow y$, suponiendo un tiempo t de estadía en y' es

$$\psi_T(y - y'; t) = \frac{1}{2} [\delta_{y, y'+1} + \delta_{y, y'-1}] \lambda_T e^{-\lambda_T t} \quad (1)$$

La partícula A , a su vez, realiza una CTRW sesgada sobre la red con una tasa de transiciones λ_A y probabilidades p_i de saltar a izquierda y p_d de saltar a derecha ($p_i + p_d = 1$) en cada transición. Para A la densidad de probabilidad para el tiempo de la transición $x' \rightarrow x$, luego de un tiempo t de estadía en x' es

$$\psi_A(x - x'; t) = [p_d \delta_{x, x'+1} + p_i \delta_{x, x'-1}] \lambda_A e^{-\lambda_A t} \quad (2)$$

Identificamos una configuración del sistema de dos partículas por el par (x, y) , dado por las posiciones de las partículas en la red. Suponemos que los procesos difusivos de las partículas A y T son estadísticamente independientes, con lo cual la probabilidad de que la configuración del sistema no cambie en un tiempo t estará dada por

$$\Phi_0(t) = e^{-\lambda t} \quad \text{con } \lambda = \lambda_A + \lambda_T \quad (3)$$

A su vez, para una configuración (x', y') , la densidad de probabilidad para el tiempo de la transición a una nueva configuración (x, y) luego de un tiempo t sin cambios resulta

$$\begin{aligned} \psi_0(x - x', y - y'; t) = & e^{-\lambda t} \times \\ & \times \left\{ \delta_{y, y'} \lambda_A [p_d \delta_{x, x'+1} + p_i \delta_{x, x'-1}] + \right. \\ & \left. + \delta_{x, x'} \lambda_T [\delta_{y, y'+1} + \delta_{y, y'-1}] \right\} \quad (4) \end{aligned}$$

Hemos despreciado aquí transiciones simultáneas de ambas partículas por ser de segundo orden en dt .

Sea $G_0(x, y; t | x_0, y_0) dt$ la probabilidad de que el sistema de dos partículas inicialmente en la configuración (x_0, y_0) pase a la configuración (x, y) entre t y $t+dt$. La densidad de probabilidad condicional para el tiempo de transición a la configuración (x, y) , G_0 debe satisfacer la relación de recurrencia

$$G_0(x, y; t | x_0, y_0) = \delta_{x,x_0} \delta_{y,y_0} \delta(t-0^+) + \sum_{x',y'} \psi_0(x-x', y-y'; t) \star G_0(x', y'; t | x_0, y_0) \quad (5)$$

y es la función de Green para el problema de la difusión de dos partículas.

En la Ec. (5) hemos representado el producto de convolución temporal entre dos funciones por el símbolo \star

$$f(t) \star g(t) = \int_0^t dt' f(t-t') g(t')$$

Obtenemos una solución analítica para la Ec. (5) tomando transformada de Fourier para cada variable espacial y transformada de Laplace para la variable temporal

$$\widehat{G}_0^L(k_A, k_T; u | x_0, y_0) = \frac{e^{ik_A x_0} e^{ik_T y_0}}{1 - \widehat{\psi}_0^L(k_A, k_T; u)} \quad (6)$$

donde representamos la transformada de Laplace de una función por el supraíndice L y la sustitución $t \rightarrow u$: $f^L(u) = \int_0^\infty dt e^{-ut} f(t)$ y la transformada de Fourier por el símbolo $\widehat{}$ y la sustitución $x \rightarrow k$: $\widehat{f}(k) = \sum_{\forall x} e^{ikx} f(x)$. Aquí

$$\widehat{\psi}_0^L(k_A, k_T; u) = \frac{\lambda_A (\cos k_A + i \Delta p \sin k_A) + \lambda_T \cos k_T}{u + \lambda} \quad (7)$$

con $\Delta p = p_d - p_i$, una medida del sesgo en la CTRW de A .

La probabilidad condicional de encontrar un par, que comenzó en la configuración (x_0, y_0) , en la configuración (x, y) al tiempo t resulta a su vez

$$P_0(x, y; t | x_0, y_0) = \Phi_0(t) \star G_0(x, y; t | x_0, y_0) \quad (8)$$

y es el producto de la probabilidad de alcanzar la configuración (x, y) a un tiempo $t' < t$ y la probabilidad de mantener dicha configuración hasta el tiempo t , sumado sobre todos los valores posibles de t' .

3 Proceso de reacción

Incluimos en nuestro esquema de CTRW de dos partículas la posibilidad de reacción en un encuentro de ambas partículas como el atrapamiento de la partícula A por T cuando ocupan la misma posición en la red: $x = y$. Denotamos por

$$\psi_r(t) = \gamma \exp(-\gamma t) \quad (9)$$

la densidad de probabilidad condicional para el tiempo de reacción, condicionado a que el par no ha cambiado de configuración desde su encuentro en una posición de red. Aquí γ es la tasa de reacción o atrapamiento. Así la probabilidad de que el sistema mantenga una configuración con ambas partículas en la misma posición en la red y sin reaccionar es

$$\Phi_1(t) = e^{-\gamma t} \Phi_0(t) \quad (10)$$

siendo $\Phi_0(t)$ la probabilidad de mantener las configuraciones con $x \neq y$ en (3).

La función de Green para el problema con atrapamiento, $G_t(x, y; t | x_0, y_0)$ satisface una relación de recurrencia similar a (5)

$$G_t(x, y; t | x_0, y_0) = \delta_{x,x_0} \delta_{y,y_0} \delta(t-0^+) + \sum_{x',y'} \psi(x-x', y-y'; t) \star G_t(x', y'; t | x_0, y_0) \quad (11)$$

donde la densidad de probabilidad para el tiempo entre transiciones es ahora

$$\psi(x-x', y-y'; t) = \begin{cases} \psi_0(x-x', y-y'; t) & \forall x' \neq y' \\ \psi_1(x-x', y-y'; t) & \forall x' = y' \end{cases} \quad (12)$$

con

$$\psi_1(x-x_e, y-x_e; t) = \{\delta_{y,x_e} \lambda_A [p_d \delta_{x,x_e+1} + p_i \delta_{x,x_e-1}] + \delta_{x,x_e} \lambda_T \frac{1}{2} [\delta_{y,x_e+1} + \delta_{y,x_e-1}]\} e^{-(\lambda+\gamma)t} \quad (13)$$

la densidad de probabilidad para el tiempo de separación sin reaccionar de las partículas luego de coincidir en una posición de red (x_e) . Cuando ambas partículas coinciden en una posición de red el proceso de difusión entra en competencia con el proceso de atrapamiento.

Para resolver la relación de recurrencia usamos una extensión del método de inhomogeneidad local⁽⁵⁾ como en⁽⁷⁾. Haciendo uso de la representación para la delta de Kronecker⁽⁶⁾

$$\delta_{x,y} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi e^{i(x-y)(\phi-k_A)} \quad (14)$$

obtenemos en la representación de Fourier-Laplace

$$\widehat{G}_t^L(k_A, k_T; u | x_0, y_0) = \widehat{G}_0^L(k_A, k_T; u | x_0, y_0) - \widehat{G}_0^L(k_A, k_T; u | y_0, y_0) \widehat{\psi}_0^L(k_A, k_T; u) \times h(k_A + k_T; u | x_0, y_0) \quad (15)$$

Definimos aquí la función

$$h(k; u | x_0, y_0) = \frac{1}{1 + \frac{2R_p R_\xi}{\gamma} \frac{\xi^{|y_0-x_0|}}{R_c^{(y_0-x_0)}}} \quad (16)$$

con

$$\begin{aligned}\Lambda_- &= p_i \lambda_A + \lambda_T e^{ik} & \Lambda_+ &= p_d \lambda_A + \lambda_T e^{-ik} \\ R_p &= \sqrt{\Lambda_- \Lambda_+} & R_c &= \sqrt{\Lambda_- / \Lambda_+} \\ R_\xi &= \sqrt{\left(\frac{u + \lambda}{2R_p}\right)^2 - 1} \\ \xi &= \frac{u + \lambda}{2R_p} - R_\xi\end{aligned}$$

Para que las partículas reaccionen, o en nuestro esquema para que A sea atrapada por T entre t y $t + dt$, en algún sitio de red que denotamos por x_e , las partículas deberán haberse encontrado en x_e a un tiempo $t' < t$. La densidad de probabilidad para el tiempo de atrapamiento, sin que las partículas se hayan separado, estará dada por

$$A(x_e; t | x_0, y_0) = \gamma e^{(-\gamma + \lambda)t} \star G_t(x_e, x_e; t | x_0, y_0) \quad (17)$$

o en la representación de Fourier-Laplace

$$\widehat{A}^L(k; u | x_0, y_0) = e^{ik y_0} h(k; u | x_0, y_0) \quad (18)$$

La probabilidad de encontrar un par $A - T$, inicialmente en la configuración (x_0, y_0) , en la configuración (x, y) al tiempo t está dada por

$$P_t(x, y; t | x_0, y_0) = \Phi(x, y; t) \star G_t(x, y; t | x_0, y_0) \quad (19)$$

el producto de la probabilidad de alcanzar la configuración entre t' y $t' + dt'$ por la probabilidad de que el par conserve la configuración hasta el tiempo $t > t'$, sumado sobre todos los valores posibles de t' . Debe notarse que

$$\Phi(x, y; t) = \begin{cases} \Phi_0(t) & x \neq y \\ \Phi_1(t) & x = y \end{cases}$$

Usando las ecuaciones (15) y (18) podemos reexpresar la probabilidad P_t como

$$\begin{aligned}P_t(x, y; t | x_0, y_0) &= P_0(x, y; t | x_0, y_0) - \\ &- \sum_{x_e} P_0(x, y; t | x_e, x_e) A(x_e; t | x_0, y_0)\end{aligned} \quad (20)$$

con una interpretación directa: la probabilidad de encontrar el par en la configuración (x, y) en presencia de reacción es la probabilidad en ausencia de reacción descontadas las contribuciones de las realizaciones en las que la partícula A ha sido atrapada en un tiempo anterior.

4 Evolución de un conjunto de partículas

Suponemos ahora la presencia de un conjunto de partículas A inicialmente uniformemente distribuidas sobre la red con una concentración c_0 . Suponemos que las partículas A no interactúan entre sí. La tasa de reacción en una posición x_e de la red resulta

$$RR(x_e; t | y_0) = c_0 \sum_{x_e} A(x_e; t | x_0, y_0) \quad (21)$$

Obtenemos una expresión en términos de los parámetros del sistema en la representación de Fourier-Laplace sustituyendo las expresiones (17) y (15)

$$\widehat{RR}^L(k; u | y_0) = \frac{c_0}{u + \lambda_T \cos k} \frac{2R_p R_\xi}{1 + \frac{2R_p R_\xi}{\gamma}} \quad (22)$$

La tasa de reacción global para el sistema de partículas, definida como $RR_g(t | y_0) = \sum_{x_e} RR(x_e; t | y_0)$, resulta en la representación de Laplace

$$RR_g^L(u | y_0) = \frac{c_0}{u} \frac{2R_p R_\xi}{1 + \frac{2R_p R_\xi}{\gamma}} \quad (23)$$

coincidente con el resultado para una trampa fija en presencia de un conjunto de partículas que realizan una CTRW con tasa de transiciones entre sitios λ .

Consideramos a continuación la evolución temporal de la concentración de partículas A : $c(x; t | y_0)$. Calculamos esta concentración a partir de la probabilidad marginal para la posición de una partícula A , que se obtiene de la probabilidad conjunta en (20), como

$$c(x; t | y_0) = c_0 \sum_{y, x_0} P_t(x, y; t | x_0, y_0) \quad (24)$$

Obtenemos una expresión explícita en la representación de Fourier-Laplace

$$\widehat{c}^L(k; u | y_0) = \frac{c_0}{u} - \frac{\Phi_0^L(u)}{1 - \widehat{\psi}_0^L(k, 0; u)} \widehat{RR}^L(k; u | y_0) \quad (25)$$

i.e. la concentración de partículas al tiempo t difiere de la concentración uniforme inicial debido al vaciamiento producido por la reacción.

5 Descripción desde la trampa

Calculamos en esta sección la concentración de partículas A descrita desde un referencial solidario a la trampa, *i.e.* la concentración en función de la coordenada $z = x - y$. A tal fin calculamos la probabilidad para la posición de una partícula A al tiempo t , condicionada a la posición inicial $z_0 = x_0 - y_0$, $P_z(z; t | z_0)$. Notamos que a esta probabilidad contribuyen todas las realizaciones con configuración inicial z_0 que al tiempo t se encuentran en una configuración z . Mediante el método de transformación de variables⁽⁸⁾ obtenemos

$$P_Z(z; t | x_0, y_0) = \sum_y P_t(z + y, y; t | x_0, y_0) \quad (26)$$

Obtenemos una expresión explícita en la representación de Fourier-Laplace

$$\begin{aligned}\widehat{P}_Z^L(k_z; u | z_0) &= \frac{e^{ik_z(x_0 - y_0)}}{(u + \lambda) \widehat{\psi}_0^L(k_z, k_z; u)} - \\ &- \frac{h(k_z; u | x_0, y_0)}{(u + \lambda) \widehat{\psi}_0^L(k_z, k_z; u)}\end{aligned} \quad (27)$$

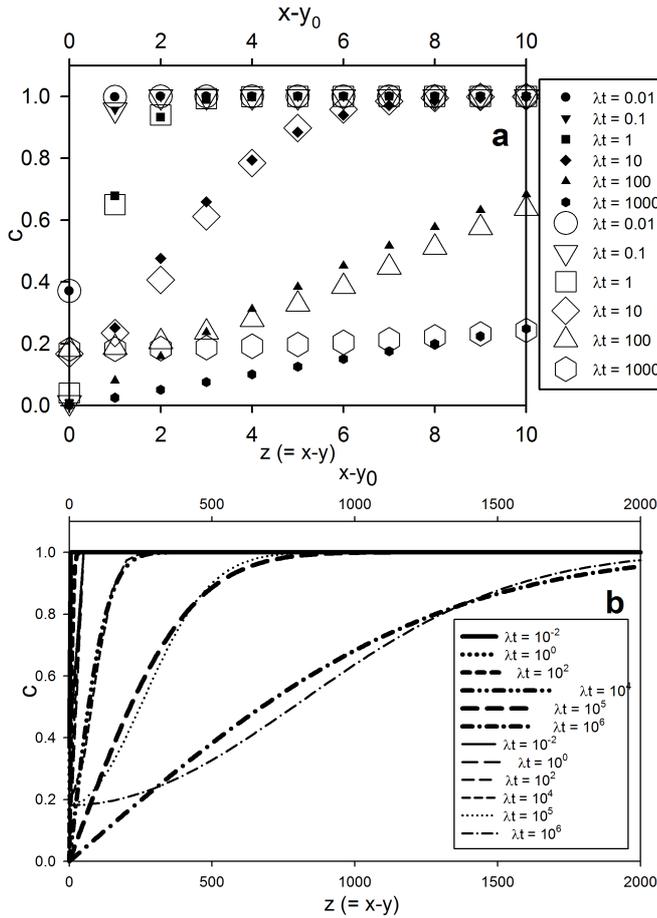


Figura 2: Concentración de partículas en presencia de una trampa móvil vs. posición relativa a la trampa (símbolos llenos en figura a, líneas gruesas en figura b) o vs. posición relativa a la posición inicial de la trampa (sistema laboratorio, símbolos huecos en figura a, líneas finas en figura b). Puede apreciarse un vaciamiento más pronunciado en torno a la posición instantánea de la trampa.

Este resultado es coincidente con el correspondiente a una CTRW en presencia de una trampa fija con tasa de transiciones λ , equivalente a suponer que el coeficiente de difusión de las partículas móviles es la suma de los coeficientes de difusión de ambas especies. La concentración al tiempo t está dada por

$$c(z; t) = \sum_{z_0} P_Z(z; t | z_0) c_0 \quad (28)$$

Pasando a la representación de Fourier-Laplace obtenemos

$$\widehat{c^L}(k_z; u) = \frac{c_0}{u} 2\pi\delta(k_z) - \frac{\lambda R R_g^L(u)}{(u + \lambda) \widehat{\psi}_0^L(k_z, k_z; u)} \quad (29)$$

Ilustramos en la figura 2 los resultados obtenidos para la concentración de la especie mayoritaria descrita desde el sistema laboratorio (con la trampa móvil) y desde el sistema fijo a la trampa. Puede observarse un mayor vaciamiento en torno a la posición instantánea de la trampa.

Consideramos a continuación el problema de la distan-

cia al vecino más próximo. Para un par en la configuración inicial z_0 , la probabilidad de que se encuentre a una distancia menor o igual que d al tiempo t es (función de distribución)

$$F_1(d; t | z_0) = \sum_{z=-d}^d P_z(z; t | z_0) \quad (30)$$

Adaptando el método en⁽⁹⁾ para el cálculo de la probabilidad de supervivencia suponemos un volumen finito $V = 2L + 1$ centrado en la posición de la trampa y una distribución uniforme de N caminantes con concentración $c_0 = N/V$. La probabilidad de que ninguno de los caminantes esté a una distancia menor que d de la trampa es

$$F_N(d, t) = \left[1 - \frac{1}{V} \sum_{z_0=-L}^L F_1(d; t | z_0) \right]^N \quad (31)$$

En el límite termodinámico ($V, N \rightarrow \infty$ manteniendo constante c_0) obtenemos para la probabilidad de una distancia mayor a d para el caminante más próximo

$$\Psi_D(d; t) = \exp \left[- \sum_{z=-d}^d c(z, t) \right] \quad (32)$$

Para llegar a esta última ecuación hemos hecho uso de (28) y alterado el orden de suma en (31). La probabilidad para la distancia al vecino más próximo, d , la obtenemos de la función de distribución (32)

$$P_D(d; t) = \Psi_D(d-1; t) - \Psi_D(d; t) \quad (33)$$

En la figura 3 se presenta la probabilidad para la distancia al vecino más próximo. El máximo de probabilidad se encuentra próximo a la trampa en los instantes iniciales para desplazarse luego alejándose de la trampa. Para la confección de los gráficos se ha reescalado el tiempo en términos de la tasa de transiciones conjunta λ

6 Resumen y Conclusiones

Se ha estudiado el problema de la reacción mediada por difusión cuando ambos reactivos difunden, generalizando los modelos considerados en la literatura. Se obtuvo una solución analítica exacta en la representación de Fourier-Laplace para un modelo de Caminata Aleatoria de Tiempo Continuo sobre una red unidimensional. Se obtuvieron así expresiones para la densidad de probabilidad para el tiempo en que el sistema alcanza una dada configuración (la función de Green del problema), la concentración promedio de la especie mayoritaria en el sistema de referencia del laboratorio y en el sistema de referencia fijo a la trampa (o especie minoritaria) y la probabilidad para la distancia al vecino más próximo. Los valores incluidos en las figuras se han obtenido mediante inversión numérica a partir de resultados analíticos exactos. Se ha verificado así analíticamente que, desde el sistema de referencia

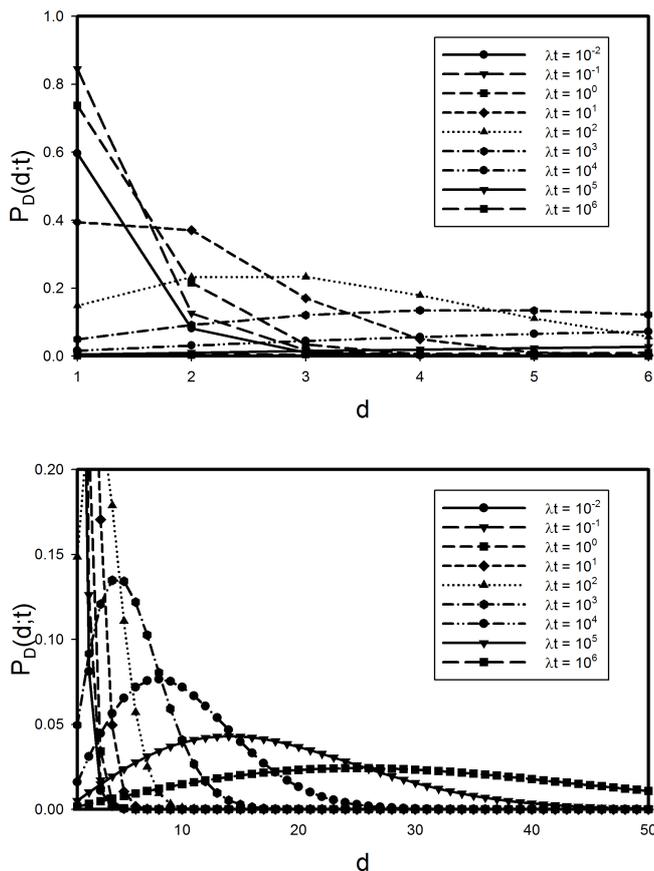


Figura 3: Probabilidad para distancia al vecino más próximo. Las distintas curvas corresponden a distintos instantes de tiempo en una escala determinada por la tasa de transiciones conjunta λ

fijo a la trampa, los resultados son coincidentes con los del problema de trampa fija con coeficiente de difusión $D = D_A + D_T$ suma de los coeficientes de difusión de ambas especies.

Para la concentración promedio se observa que la zona de vaciamiento es más extendida y menos profunda en el sistema de referencia del laboratorio cuando se compara con los valores obtenidos en el sistema fijo a la trampa. En el análisis de este resultado debe tenerse presente que los valores obtenidos son valores promedios.

La probabilidad para la distancia al vecino más próximo presenta un máximo en las inmediaciones de la ubicación de la trampa a tiempos cortos. En los gráficos presentados el tiempo se presenta en unidades de un tiempo medio efectivo $t_e = 1/\lambda$, el tiempo medio entre transiciones para el problema de trampa fija con coeficiente de difusión de los caminantes suma de los coeficientes de cada especie. El máximo para la distancia al vecino más próximo comienza a apartarse de la posición de la trampa para valores aproximados de $\lambda t \simeq 10^2$.

Como se ha señalado en trabajos anteriores, el com-

portamiento a tiempos cortos de la tasa de reacción refleja la dinámica del proceso de reacción cuando el proceso de difusión aún no ha tenido efecto. Trabajo en esta línea para el problema de trampa móvil está en estudio y será motivo de próximas comunicaciones.

Agradecimientos: Los autores agradecen el financiamiento de SCyT-UTN para este proyecto.

Referencias

- [1] R. Smoluchowski, Z. Phys. Chem. **29**, 129 (1917).
- [2] Z. Koza y H. Taitelbaum, Phys. Rev. E **57**, 237 (1998).
- [3] A. D. Sánchez, M. A. Rodríguez y H. S. Wio, Phys. Rev. E **57**, 6390 (1998).
A. D. Sánchez, Phys. Rev. E **59**, 5021 (1999).
- [4] C. A. Condat, Z. Phys. B **77**, 313 (1989).
- [5] M. A. Ré y C. E. Budde, Anales AFA **9**, 6 (1998).
M. A. Ré y C. E. Budde, Phys. Rev. E **61**, 1110 (2000).
M. A. Ré, C. E. Budde y M. O. Cáceres, Phys. Rev. E **54**, 4427 (1996).
- [6] C. Aslangul, J. Stat. Phys. **94**, 219 (1999).
- [7] M. A. R y D. P. Prato, Anales AFA, **11**, 19 (1999).
- [8] A. Papoulis, "Probability, Random Variables and Stochastic Processes", 3 edición, McGraw-Hill, pag. 166: system reliability.
- [9] J. T. Bendler y M. F. Shlesinger in *The wonderful World of Stochastics*, edited by M. F. Shlesinger y G. H. Weiss, Elsevier, Amsterdam (1985).