

# Activación Resonante: Aproximación de Caminatas Aleatorias

Miguel A. Ré y Carlos E. Budde

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

Se considera el problema del escape de una partícula desde una región finita por sobre una barrera de potencial fluctuante. La magnitud principal a determinar es el tiempo medio de escape de la región de confinamiento. Se presenta una solución generalizada, en el esquema de las caminatas aleatorias de tiempo continuo, al problema enunciado para un medio que presenta fluctuaciones entre dos estados controladas por una dinámica independiente. Se define una densidad de tiempo de pausa efectiva en cada sitio que toma en cuenta las fluctuaciones del medio. Se considera la relación entre el tiempo medio de escape y la frecuencia de fluctuaciones del medio en busca de la condición de activación resonante y su dependencia con la posición inicial del caminante y el tamaño de la región.

The problem of a particle escaping from a finite region over a fluctuating barrier is considered. The main magnitude to be calculated here is the mean exit time for a particle that makes a random walk on a lattice. It is presented a general solution for a fluctuating medium between two configurations. The switching is given by a statistically independent dynamics. The solution is given in the continuous time random walk scheme. It is defined an effective waiting time density for each site of the lattice that takes into account the medium fluctuations. The relationship between the mean exit time and the fluctuations frequency is studied looking for the resonant activation condition and its dependence with the initial position of the walker and the region size.

Pacs N<sup>o</sup> 05.40+j; 05.60.+w; 02.50+Ey; 82.20 Fd

## 1 Introducción

El movimiento de una partícula en medios desordenados ha sido estudiado usualmente en uno de los dos casos extremos: suponiendo que las fluctuaciones del medio son extremadamente rápidas cuando se las compara con la escala de tiempos del movimiento de la partícula o, por el contrario, suponiendo que las fluctuaciones del medio son infinitamente lentas comparadas con la escala de tiempo de los desplazamientos. En la primera aproximación encontramos el límite markoviano: la partícula sensa un “entorno promedio” sin memoria, en tanto que en el segundo límite encontramos un desorden “congelado”.

La situación intermedia, con una escala de tiempo comparable para ambos procesos ha recibido quizás una atención comparativamente menor hasta hace pocos años. El problema de la difusión en presencia de fluctuaciones o desorden dinámico global y/o local ha despertado el interés de investigadores en diversas áreas. Entre estas áreas de interés podemos citar como ejemplo el estudio de caminatas aleatorias en presencia de desorden dinámico global<sup>(1)</sup> o desorden dinámico local<sup>(2,3)</sup>, el transporte de partículas Brownianas en medios multiestado<sup>(4,5)</sup>, activación resonante sobre barreras fluctuantes<sup>(6,7)</sup>, el escape de sistemas fluctuantes<sup>(8)</sup>, dinámica de transición en sistemas biológicos<sup>(9)</sup> o difusión en medios fluctuantes<sup>(10)</sup>.

Desde la propuesta original de Kramers<sup>(11)</sup> para la difusión de una partícula Browniana en un doble pozo de potencial, un creciente número de trabajos se han publicado en consonancia con el crecimiento de resultados experimentales. De particular interés ha resultado el trabajo de Doering y Gadoua<sup>(6)</sup> antes citado en el que se calcula la tasa de escape por sobre una barrera fluctuante entre los valores  $E_0 \pm \Delta E$  obteniendo resultados para  $E_0 = 0$  o fluctuaciones de la barrera entre 0 y un valor constante. Interesantemente se encuentra que el tiempo medio de escape en función de la tasa de transiciones del medio presenta un mínimo, un fenómeno conocido como “activación resonante”.

En esta comunicación consideramos el problema de la activación resonante para un medio fluctuante entre dos configuraciones desde la perspectiva de las caminatas aleatorias de tiempo continuo. Los cambios de estado del medio están regulados por una dinámica markoviana independiente del proceso de transporte de los caminantes. La caminata aleatoria se desarrolla en una red finita delimitada en un extremo por un sitio reflectante y en el otro por una trampa cuya tasa de atrapamiento fluctúa entre dos valores, estando regulado el proceso por la dinámica que modifica el medio. Se calcula el tiempo medio de escape por sobre una barrera de potencial.

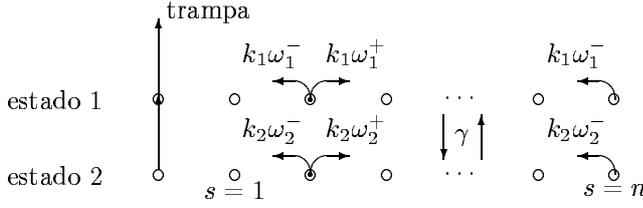


Figura 1: Caminata aleatoria de tiempo continuo en una red unidimensional finita de  $n$  sitios. La red fluctúa entre dos estados con una frecuencia de transiciones  $\gamma$ , modificando las propiedades difusivas de la partícula: en cada estado las transiciones se producen con una frecuencia  $k_i\omega_i^-$  ( $i = 1, 2$ ) a izquierda y  $k_i\omega_i^+$  a derecha. En el extremo  $s = n$  suponemos una condición de borde reflectante de modo que el caminante sólo puede hacer una transición al sitio  $s = n - 1$ . En el otro extremo ( $s = 1$ ) suponemos la conexión con una trampa. Una vez que el caminante cae en ella no puede regresar a la red y finaliza el proceso.

## 2 Descripción del Modelo

Consideramos una partícula que realiza una caminata aleatoria de tiempo continuo con saltos a primeros vecinos sobre una red unidimensional finita de  $n$  sitios que fluctúa entre dos estados. Identificamos los sitios de red por un número entero e imponemos las siguientes condiciones de contorno: en el extremo que denominamos  $n$  tenemos una condición reflectante en tanto que el otro extremo de la red, el sitio 1, está conectado a una trampa de modo tal que una vez que la partícula ha caído en ella no puede regresar a la red. El atrapamiento del caminante representa el escape de la partícula por sobre una barrera fluctuante como en el modelo de Doering y Gadoua<sup>(6)</sup>.

En cada estado de la red la partícula efectúa una caminata aleatoria con frecuencia de saltos  $k_i$  ( $i = 1, 2$ ). A su vez supondremos también un sesgo distinto en cada estado:  $\omega_i^+$ ,  $\omega_i^-$  ( $\omega_i^+ + \omega_i^- = 1$ ) de modo que en el estado  $i$  la frecuencia de saltos hacia la derecha del caminante será  $k_i\omega_i^+$ , en tanto que los saltos a la izquierda serán con una frecuencia  $k_i\omega_i^-$  y por lo tanto la densidad de probabilidad para las transiciones entre sitios, suponiendo fijo el estado de la red, es

$$\psi^{(i)}(s, s'; t) = \Omega_i k_i e^{-k_i t} \quad (1)$$

con  $\Omega_i = \omega_i^+ \delta_{s, s'+1} + \omega_i^- \delta_{s, s'-1}$

de manera tal que la probabilidad para la transición  $s' \rightarrow s$ , cuando ha transcurrido un tiempo entre  $t$  y  $t + dt$  desde la llegada a  $s'$  es  $\psi^{(i)}(s, s'; t) dt$  para el sistema en estado  $i$ .

Las transiciones entre estados del sistema se suponen a su vez reguladas por una dinámica de primer orden simétrica con frecuencia de transiciones  $\gamma$ . La

dinámica de las transiciones se supone independiente de la dinámica que controla el desplazamiento del caminante en la red y la densidad de probabilidad para el tiempo entre transiciones es  $\gamma e^{-\gamma t}$ . En la figura 1 ilustramos esquemáticamente el modelo propuesto.

### 2.1 El proceso de difusión frente a cambios de estado

Consideramos aquí la densidad de probabilidad para las transiciones entre sitios de la red, incluidos en la misma los efectos de las fluctuaciones. Definimos la densidad de probabilidad para las transiciones entre sitios  $\psi_{ij}(s, s'; t)$  de manera tal que si la partícula llegó al sitio  $s'$ , con el sistema en estado  $j$  al tiempo  $t'$ ,  $\psi_{ij}(s, s'; t - t') dt$  es la probabilidad de que el caminante haga una transición al sitio  $s$  con el sistema en estado  $i$  entre  $t$  y  $t + dt$ . Para calcular la densidad de probabilidad  $\psi_{ij}$  distinguimos dos situaciones posibles para esta transición: el sistema se encuentra en el mismo estado que estaba cuando llegó a  $s'$  el caminante ( $i = j$ ) o, por el contrario, se encuentra en el estado complementario ( $i \neq j$ ). Al primer caso contribuyen las realizaciones mutuamente excluyentes en las que el sistema no efectúa transiciones (manteniendo el estado del instante de arribo) o bien efectúa un número par de transiciones. Sumando sobre todas estas contribuciones obtenemos finalmente

$$\psi_{jj}(s, s'; t) = \Omega_j k_j e^{-(\gamma+k_j)t} + \Omega_j k_j e^{-(\gamma+k_j)t} \star \gamma e^{-(\gamma+k_i)t} \star \gamma e^{-(\gamma+k_j)t} + \dots \quad (2)$$

donde el símbolo  $\star$  indica el producto de convolución entre las funciones

$$f(t) \star h(t) = \int_0^t dt' f(t-t') h(t') \quad (3)$$

En lo que sigue indicamos la transformada de Laplace de una función dependiente del tiempo por la sustitución  $t \rightarrow u$  en el argumento:  $f(u) = \mathcal{L}[f(t)] = \int_0^\infty dt e^{-ut} f(t)$ . Usando el hecho de que la transformada de Laplace de un producto de convolución entre funciones es el producto de las transformadas de estas funciones

$$\mathcal{L}[f(t) \star h(t)] = f(u) h(u) \quad (4)$$

podemos sumar la expresión (2) de una manera simple. Procediendo de manera similar con el segundo caso ( $i \neq j$ ) obtenemos finalmente

$$\begin{aligned} \psi_{jj}(s, s'; u) &= \frac{\Omega_j k_j (u + k_j + \gamma)}{D} \\ \psi_{ij}(s, s'; u) &= \frac{\Omega_i k_i \gamma}{D} \end{aligned}$$

donde  $i \neq j$   $i, j = 1, 2$   
 $D = (u + k_1 + \gamma)(u + k_2 + \gamma) - \gamma^2$   
 $s, s' = 1 \dots n - 1$  (5)

Quedan por incluir las condiciones de borde del modelo. Según ya mencionamos suponemos una condición reflectante en el sitio  $s = n$ . Esto significa que desde el sitio  $n$  sólo podrá haber transiciones al sitio  $n - 1$ . En este caso seguimos suponiendo que la frecuencia de saltos a izquierda es  $\omega_i^- k_i$ . Obtenemos así

$$\begin{aligned} \psi_{jj}(n-1, n; u) &= \frac{\omega_j^- k_j (u + \omega_i^- k_j + \gamma)}{D'} \quad i \neq j \\ \psi_{ij}(n-1, n; u) &= \frac{\omega_i^- k_i \gamma}{D'} \quad i, j = 1, 2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{donde } i \neq j & \quad i, j = 1, 2 \\ D' &= (u + \omega_1^- k_1 + \gamma)(u + \omega_2^- k_2 + \gamma) - \gamma^2 \end{aligned} \quad (6)$$

La condición absorbente en el extremo  $s = 1$  queda incluida simplemente permitiendo la transición  $1 \rightarrow 0$ , manteniendo así la densidad de probabilidad para las transiciones en general como en (5) para el sitio  $s' = 1$ . De esta forma el escape de la región de interés queda incluido en el modelo mediante la transición al sitio 0.

### 3 Tiempo medio de escape

La magnitud a calcular en este trabajo es el tiempo medio de escape de la red. Si denotamos por  $E(s_0; t)$  la densidad de probabilidad para el tiempo de escape; de manera tal que  $E(s_0; t) dt$  es la probabilidad de que el primer pasaje por el sitio 0 de una partícula que comenzó su caminata en el sitio  $s_0$  sea entre  $t$  y  $t + dt$ ; el tiempo medio de escape puede calcularse por

$$\tau(s_0) = \int_0^\infty dt t E(s_0; t) \quad (7)$$

o, equivalentemente, a partir de la transformada de Laplace

$$\tau(s_0) = \lim_{u \rightarrow 0} \frac{1 - E(s_0; u)}{u} \quad (8)$$

Para calcular  $E(s_0; t)$  adaptamos el método propuesto por Haus y Kehr<sup>(12)</sup> para los modelos de atrapamiento múltiple definiendo  $\chi_{ij}(s-1, s; t)$  como la densidad de probabilidad para el tiempo del primer pasaje por el sitio  $s-1$  con el sistema en estado  $i$ , suponiendo que la caminata comenzó en el sitio  $s$  con el sistema en estado  $j$ . En particular si  $s_0 = 1$

$$E(1; t) = \sum_{i,j} \chi_{ij}(0, 1; t) g_j \quad (9)$$

donde  $g_j$  corresponde a la distribución de probabilidad inicial para los estados del sistema.

La densidad de probabilidad para el primer pasaje cumple con la siguiente relación de recurrencia en la representación de Laplace<sup>(12)</sup>

$$\begin{aligned} \chi_{ij}(s-1, s; u) &= \psi_{ij}(s-1, s; u) + \\ &+ \sum_{lm} \chi_{il}(s-1, s; u) \chi_{lm}(s, s+1; u) \psi_{mj}(s+1, s; u) \end{aligned} \quad (10)$$

El primer término corresponde a la contribución de aquellas realizaciones en las que el caminante hace la transición  $s \rightarrow s-1$  en forma directa en tanto que el segundo término corresponde a la contribución de aquellas realizaciones en las que el caminante previo a la visita al sitio  $s-1$  hace una incursión en la cadena a partir de una transición  $s \rightarrow s+1$ , retornando posteriormente al sitio  $s$  para hacer la primer transición  $s \rightarrow s-1$ .

La relación de recurrencia se ha dado en la representación de Laplace dado que los productos de convolución temporales se reducen a simples productos. Resolviendo la ecuación en la representación de Laplace obtenemos la relación de recurrencia

$$\chi_{ij}(s-1, s; u) = \sum_l \psi_{il}(s-1, s; u) R_{lj}(u) \quad (11)$$

donde

$$R_{lj}(u) = \frac{1}{\Delta} [A_{lj}(s; u)]$$

con

$$A_{lj}(u) = \sum_m \chi_{lm}(s, s+1; u) \psi_{mj}(s+1, s; u)$$

$$\Delta = [1 - A_{11}(u)] [1 - A_{22}(u)] - A_{12}(u) A_{21}(u) \quad (12)$$

La relación de recurrencia conduce así a una representación de fracción continua generalizada para la densidad de probabilidad de escape. Dado que consideramos una red finita, esta fracción continua será finita en virtud de la condición de borde

$$\chi_{ij}(n-1, n; u) = \psi_{ij}(n-1, n; u) \quad (13)$$

con  $\psi_{ij}$  dada en (6)

Estamos ahora en condiciones de calcular  $E(s_0; u)$ , la transformada de Laplace de la densidad de probabilidad para el tiempo de escape para una partícula que comienza su caminata aleatoria en  $s_0$ . Para ello notamos que si este caminante ha de ser atrapado al tiempo  $t$  por la trampa ubicada en el sitio 0 deberá visitar todos los sitios intermedios  $s_0 - 1, s_0 - 2, \dots$ , antes de arribar a  $s = 0$  en tiempos anteriores a  $t$ . Si denotamos por  $t_{s_0-1}$  el instante del primer arribo a  $s_0 - 1, t_{s_0-2}$  el instante de arribo a  $s_0 - 2$ , etc. con la relación  $t_1 > t_2 > \dots > t_{s_0-1}$ , esta condición nos dice que la densidad  $E(s_0; t)$  estará dada por el producto de convolución de las densidades  $\chi_{ij}(s-1, s; t)$  para cada uno de los sitios intermedios entre  $s_0$  y 0. Este producto en la representación de Laplace es

$$\begin{aligned} E(s_0; u) &= \sum_{i_0 \dots i_{s_0-1}} \chi_{i_0 i_1}(0, 1; u) \chi_{i_1 i_2}(1, 2; u) \\ &\dots \chi_{i_{s_0-1} i_{s_0}}(s_0 - 1, s_0; u) g_{i_0} \end{aligned} \quad (14)$$

Aún cuando la suma indicada resulta un tanto compleja de calcular debemos recordar que el tiempo medio de escape está determinado por el comportamiento de la función alrededor de  $u = 0$ . Bastará así calcular el primer término del desarrollo en serie de potencias de la función alrededor de  $u = 0$ .

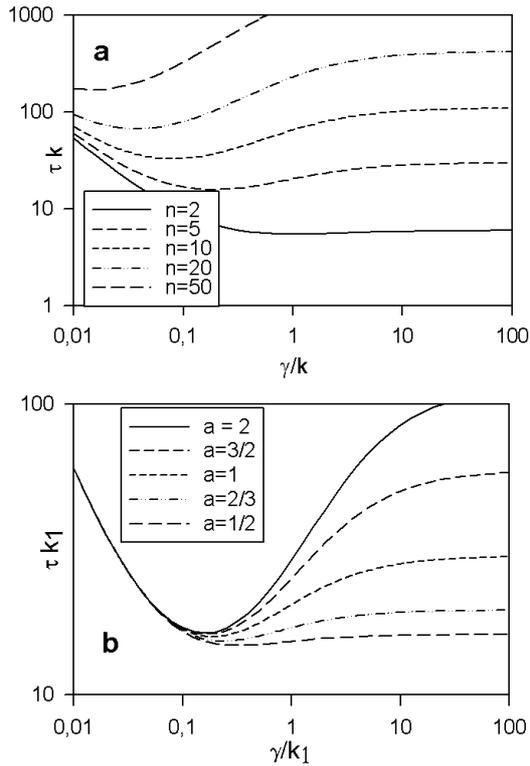


Figura 2: Proceso de activación resonante para el caso de sesgo total en los estados del sistema. El gráfico **a** ilustra el resultado para el caso simétrico, donde la frecuencia de saltos es la misma en ambos estados. La diferencia está dada por el sentido del salto. Se ilustran los resultados para distintas longitudes de la red. El gráfico **b** corresponde a un caso asimétrico, donde la frecuencia de salto es distinta en cada salto, manteniendo la situación de sesgo total. Se ilustran los resultados para distintos valores de la asimetría en los saltos  $a = k_2/k_1$ .

### 3.1 Resultados particulares

Consideramos algunos resultados particulares obtenidos a partir de la expresión (8). Presentamos en primer lugar el caso simple en el que ambos estados de la red son coincidentes y por lo tanto el “cambio de estado” no afecta al proceso de difusión; *i.e.*  $k_1 = k_2 = k$  y  $\omega_1^+ = \omega_2^+ = \omega^+$ . Obtenemos para esta situación

$$\tau(n) = \frac{1}{\omega^- k} \frac{1 - \left(\frac{\omega^+}{\omega^-}\right)^n}{1 - \frac{\omega^+}{\omega^-}} \quad (15)$$

Como era de esperar, el tiempo medio de escape no depende de  $\gamma$ , ya que las propiedades de difusión de la partícula no se modifican con los cambios de estado del sistema cuando están regidos por una dinámica markoviana. Este resultado puede compararse con el

equivalente obtenido en<sup>(12)</sup> para el tiempo medio de atrapamiento en el modelo de atrapamiento múltiple ya mencionado.

En el otro extremo consideramos el caso de un sesgo total en cada estado, *i.e.*  $\omega_1^- = \omega_2^+ = 1$ . Para esta situación resulta

$$\tau(n) = 2 \left\{ \frac{n + \frac{k_2}{\gamma}}{k_1 - k_2} + \frac{k_2(\gamma + k_1)}{\gamma(k_1 - k_2)^2} \times \left[ \frac{k_2}{k_1} \left( \frac{k_2(\gamma + k_1)}{k_1(\gamma + k_2)} \right)^{n-1} - 1 \right] \right\} + \frac{g_2}{\gamma} \quad (16)$$

En la figura 2 ilustramos este resultado para: a) el caso “simétrico”, correspondiente a  $k_1 = k_2 = k$ , para distintos valores de  $n$ , el tamaño de la red y b) para distintos valores del cociente  $a = k_2/k_1$  para un valor fijo de  $n = 5$ . La existencia de un mínimo en estas curvas ilustra el fenómeno de activación resonante.

## 4 Conclusiones

Hemos presentado un modelo de caminatas aleatorias de tiempo continuo para una red finita que fluctúa entre dos estados. A partir del modelo formulado se ha dado una expresión para el tiempo medio de escape. Se han presentado resultados analíticos para dos casos extremos: cuando las fluctuaciones del medio no afectan las propiedades de difusión de la partícula, en cuyo caso el tiempo medio de escape resulta independiente de la frecuencia de fluctuaciones, y cuando las fluctuaciones llevan a dos estados completamente sesgados. En este último caso notamos que las fluctuaciones dan lugar al fenómeno de activación resonante, observable en el mínimo de la curva de  $\tau$ , el tiempo medio de escape, vs.  $\gamma$  la tasa de fluctuaciones del medio. En las figuras se han ilustrado los resultados para un caso simétrico, en el que la tasa de transición entre sitios es la misma en cada estado (aún cuando el sesgo es opuesto en cada uno de ellos) y la dependencia con  $n$  el tamaño de la red. Notamos que aún cuando  $\tau$  crece con el número de sitios en la red para valores mayores de  $n$  el efecto se hace más notorio. Por otra parte, en el segundo gráfico se ha ilustrado el efecto de la asimetría en las tasas de transición entre sitios, indicado por el cociente  $a = k_2/k_1$ . En este caso notamos que el efecto se hace más marcado para valores crecientes de  $a$ .

Es de esperar que en situaciones intermedias el efecto de activación resonante esté también presente, quizás en forma no tan marcada. Continuaremos en esta línea de trabajo, recurriendo incluso a métodos numéricos.

**Agradecimientos:** Los autores agradecen el financiamiento de Agencia Córdoba Ciencia y SeCyT-UNC para este proyecto.

## Referencias

- [1] C. E. Budde y M. O. Cáceres, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 2712 (1988).
- [2] C. E. Budde, M. O. Cáceres y M. A. Ré, *Europhys. Lett.* **32**, 205 (1995).  
M. O. Cáceres, C. E. Budde y M. A. Ré, *Phys. Rev. E* **52**, 3462 (1995).  
M. A. Ré, C. E. Budde y M. O. Cáceres, *Phys. Rev. E* **54**, 4427 (1996).
- [3] J. L. Spouge, A. Szabo y G. H. Weiss, *Phys. Rev. E* **54**, 2248 (1996).
- [4] N. G. Van Kampen, *Physica A* **96**, 435 (1979).
- [5] G. H. Weiss, *J. Stat. Phys.* **8** 221 (1973).
- [6] C. R. Doering y J. C. Gadoua, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2318 (1992).
- [7] M. Bier y D. Astumian, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1649 (1993).
- [8] A. Bar-Haim y J. Klafter, *Phys. Rev. E* **60**, 2554 (1999).
- [9] W. Sung y P. J. Park, *Physica A* **254**, 62 (1998).
- [10] J. A. Revelli, C. E. Budde y H. S. Wio, *Physica A*, in Press.
- [11] H. A. Kramers, *Physica* **7**, 284 (1940).
- [12] J. W. Haus y K. W. Kehr, *Phys. Rep.* **150**, 261 (1987).