

# Optimización de transporte en medios fluctuantes

Miguel A. Ré y Carlos E. Budde

Facultad de Matemática, Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba  
 Ciudad Universitaria - (5010) - Córdoba - Argentina  
*e-mail: re@alerce.fis.uncor.edu / re@famaf.unc.edu.ar*

Se considera el transporte estocástico de partículas a través de medios fluctuantes. El estudio se basa en un modelo de caminatas aleatorias de una partícula que se desplaza sobre una red unidimensional que incluye dos trampas que fluctúan entre un estado activo y uno inactivo.

En general los problemas en medios fluctuantes se han estudiado en dos aproximaciones: cuando las fluctuaciones son muy rápidas comparadas con la escala de tiempos definida por las transiciones de la caminata aleatoria se obtiene un límite Markoviano correspondiente a un medio sin memoria. Alternativamente, cuando las fluctuaciones son muy lentas el medio presenta un desorden congelado.

En esta comunicación consideramos la situación intermedia en la que la frecuencia de las fluctuaciones de las trampas es comparable con la frecuencia de las transiciones en el desplazamiento. En esta situación se obtiene la probabilidad de que la partícula atraviese la región de trampas y se investiga la posibilidad de optimización de esta probabilidad en función del cociente de las frecuencias de fluctuaciones de las trampas y de las transiciones en la caminata aleatoria.

In this communication it is considered the stochastic transport of particles through fluctuating media. The study is based on an one dimensional random walk model with two fluctuating traps. Each trap switches between an active and an inactive state.

Generally random walk problems in fluctuating media have been considered in two approximations: in the fast fluctuations limit, as compared to the time scale of the walker transitions we have the markovian limit of a memoryless system. On the other hand, in the slow fluctuations limit as compared to the walker motion, we have a quenched disorder.

We consider here the intermediate situation when fluctuations frequency and hopping frequency are of the same order. Under this condition we calculate the probability that a particle goes through the trap region without trapping and the optimization of time escape as a function of the frequency quotient is considered.

Pacs N<sup>0</sup> 87.23.-n, 05.40.-a

## 1 Introducción

Los fenómenos de transporte en medios que presentan fluctuaciones de carácter global o local han sido extensamente estudiados en los últimos años. Mencionemos como ejemplos de tales procesos la activación resonante en difusión a través de barreras de potencial intermitentes<sup>(1)</sup>, el escape en problemas de entornos fluctuantes<sup>(2)</sup>, la difusión de ligandos en presencia de compuertas o de trampas dinámicas<sup>(3-5)</sup>, la optimización de estrategias de búsqueda de blancos ocultos<sup>(5)</sup>, etc.

En el estudio del transporte en sistemas donde el atrapamiento es debido a fluctuaciones locales se ha considerado la presencia de una trampa dinámica y se han evaluado las magnitudes que caracterizan este fenómeno, tales como la Densidad de probabilidad de absorción y la Probabilidad de supervivencia del caminante<sup>(3,4)</sup>. Obviamente esta simplificación

del problema no contempla fenómenos tales como el transporte de moléculas en presencia de canales iónicos distribuidos en las membranas celulares<sup>(6)</sup>, Transiciones de percolación en medios dinámicamente desordenados<sup>(7)</sup>, etc.

Como un aporte al análisis del atrapamiento en medios fluctuantes presentamos en esta comunicación un modelo basado en el esquema de caminatas aleatorias que incluye la presencia de dos trampas cuyos estados cambian aleatoriamente entre uno activo y otro inactivo. Las escalas de tiempo que caracterizan los desplazamientos en la red y las de las transiciones entre los estados de las trampas se definen de manera independiente y pueden ser del mismo orden, lo que permite generalizar las aproximaciones usuales como las de "desorden congelado" o "entorno promedio". Las fluctuaciones entre los estados de las trampas se modela mediante un proceso estocástico Markoviano y se

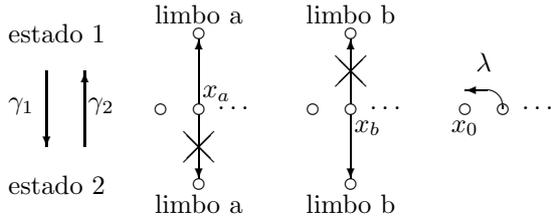


Figura 1: Esquema del modelo unidimensional formulado. La frecuencia de transiciones del caminante sobre la red es  $\lambda$  en tanto que las correspondientes a los cambios de estado son  $\gamma_1$  y  $\gamma_2$  respectivamente. En el estado 1 se activa la trampa en  $x_a$ , pudiendo el caminante ser atrapado cuando alcanza esa posición. En este estado la trampa en  $x_b$  está desactivada y es un sitio regular de red. A su vez en el estado 2 la trampa en  $x_b$  está activa y la trampa en  $x_a$  inactiva, revirtiéndose la situación (la trampa  $x_b$  puede atrapar al caminante y  $x_a$  es un sitio regular de red)

incluye la posibilidad de asimetrías en las frecuencias de salto entre estados. Se halla una expresión analítica para la probabilidad de que la partícula atraviese la región comprendida entre las trampas encontrándose un valor máximo para esta magnitud en función del cociente de frecuencias de fluctuaciones de las trampas. Este valor óptimo para la transmisión corresponde a un mínimo en la probabilidad de atrapamiento por ambas trampas.

## 2 Formulación del modelo

Suponemos una partícula que realiza una caminata aleatoria partiendo de la posición  $x_0$ . En ausencia de inhomogeneidades, la densidad de probabilidad para el desplazamiento de la partícula está dada por

$$\psi(x - x'; t) = \delta_{x, x' - 1} \lambda e^{-\lambda t} \quad (1)$$

con  $\lambda^{-1}$  el tiempo medio de permanencia en el sitio  $x'$ . La densidad asumida presupone un desplazamiento hacia valores decrecientes de  $x$  como se ilustra en la figura 1.

El desplazamiento del caminante en las regiones libres de trampas puede describirse por la densidad condicional de probabilidad para el tiempo de arribo a un sitio  $x$ , suponiendo que parte de  $x_0$  en  $t = 0$ :  $G^{(0)}(x; t | x_0)$  que resulta

$$\begin{aligned} G^{(0)}(x; t | x') &= \lambda \frac{(\lambda t)^{x' - x - 1}}{(x' - x - 1)!} \quad x < x' \\ &= \delta_{x, x'} \delta(t - 0^+) \quad x = x' \end{aligned} \quad (2)$$

Este resultado se obtiene notando que para desplazarse del sitio  $x'$  al sitio  $x$  ( $x < x'$ ) el caminante debe efectuar  $x' - x$  transiciones. La densidad de probabilidad para el tiempo que le toma al caminante

efectuar este número de transiciones es el producto de convolución  $x' - x - 1$  veces de la densidad exponencial (2).

Suponemos ahora la presencia de dos trampas en las posiciones  $x_a$  y  $x_b$  fluctuando entre un estado activo y uno pasivo en contrafase como se muestra en la figura 1. Esto significa que en el estado que llamaremos 1 la trampa en  $x_a$  está activa en tanto que la trampa en  $x_b$  está pasiva. En el estado 2 la situación se revierte estando la trampa  $x_a$  en estado pasivo y la trampa en  $x_b$  en estado activo. La dinámica de cambio de estado para las trampas la suponemos  $f_i = \gamma_i \exp(-\gamma_i t)$  con  $\gamma_i^{-1}$  el tiempo medio de permanencia del sistema en el estado  $i$ , de manera tal que si se activa la trampa  $x_a$  en  $t = 0$  (estado 1) la probabilidad para el tiempo para que su desactivación se de entre  $t$  y  $t + dt$  es  $f_1 = \gamma_1 \exp(-\gamma_1 t)$ .

## 3 Probabilidad de escape

Al llegar el caminante al sitio  $x_b$  (al primer sitio trampa que llega pues hemos supuesto que parte de  $x_0 > x_b$ ) el atrapamiento puede darse a través de dos eventos mutuamente excluyentes:

**evento 1:** cuando el caminante llega a  $x_b$  la trampa está activa (estado 2). La probabilidad para este evento es

$$A_b(2; t | x_0, j) = P_{2j}(t) G^{(0)}(x_b; t | x_0) \quad (3)$$

Expresamos este resultado en la representación de Laplace, de mayor utilidad en el resto del trabajo. En lo que sigue de este trabajo representamos la transformada de Laplace de una función sustituyendo  $t \rightarrow u$  en su argumento. Obtenemos así

$$\begin{aligned} A_b(2; u | x_0, j) &= \frac{\gamma_1}{\gamma} \left( \frac{\lambda}{u + \lambda} \right)^{x_0 - x_b} + \\ &+ \left( \delta_{2,j} - \frac{\gamma_1}{\gamma} \right) \left( \frac{\lambda}{u + \lambda + \gamma} \right)^{x_0 - x_b} \end{aligned} \quad (4)$$

con  $\gamma = \gamma_1 + \gamma_2$ .

**evento 2:** cuando el caminante llega a  $x_b$  encuentra la trampa en estado pasivo (estado 1) y por lo tanto, para que exista atrapamiento, la trampa debe activarse antes de que el caminante abandone la posición  $x_b$

$$\begin{aligned} A_b(1; t | x_0, j) &= \gamma_1 e^{-(\gamma_1 + \lambda)t} \star \\ &\star P_{1,j}(t) G^{(0)}(x_b; t | x_0) \end{aligned} \quad (5)$$

En esta expresión el símbolo  $\star$  representa un producto de convolución  $f(t) \star g(t) = \int dt' f(t - t')g(t')$ . El resultado expresado en la representación de Laplace es

$$\begin{aligned} A_b(1; u | x_0, j) &= \frac{\gamma_1}{u + \gamma_1 + \lambda} \left\{ \frac{\gamma_2}{\gamma} \left( \frac{\lambda}{u + \lambda} \right)^{x_0 - x_b} + \right. \\ &+ \left. \left[ \delta_{1,j} - \frac{\gamma_2}{\gamma} \right] \left( \frac{\lambda}{u + \lambda + \gamma} \right)^{x_0 - x_b} \right\} \end{aligned} \quad (6)$$

La partícula sólo puede escapar de la posición  $x_b$  si encuentra la trampa en estado pasivo y esto no se activa antes de que el caminante haga una nueva transición. El escape de la posición  $x_b$  se producirá por una transición a la posición  $x_{b-1}$ . La densidad de probabilidad para el tiempo de arribo a esta posición será

$$G(x_b - 1; t | x_0, j) = \lambda e^{-(\gamma_1 + \lambda)t} \star P_{1,j}(t) G^{(0)}(x_b; t | x_0) \quad (7)$$

o en la representación de Laplace

$$G(x_b - 1; u | x_0, j) = \frac{\lambda}{u + \gamma_1 + \lambda} \left\{ \frac{\gamma_2}{\gamma} \left( \frac{\lambda}{u + \lambda} \right)^{x_0 - x_b} + \left[ \delta_{1,j} - \frac{\gamma_2}{\gamma} \right] \left( \frac{\lambda}{u + \lambda + \gamma} \right)^{x_0 - x_b} \right\} \quad (8)$$

En la siguiente trampa, ubicada en la posición  $x_a$ , de manera similar a lo discutido para la posición  $x_b$ , el atrapamiento se produce a través de dos eventos mutuamente excluyentes:

**evento 3:** la partícula encuentra la trampa activa (estado 1) cuando llega a  $x_a$ , en cuyo caso

$$A_a(1; t | x_b - 1, 1) = P_{1,1}(t) G^{(0)}(x_a; t | x_b - 1) \quad (9)$$

o alternativamente en la representación de Laplace

$$A_a(1; u | x_b - 1, j) = \frac{\gamma_2}{\gamma} \left( \frac{\lambda}{u + \lambda} \right)^{x_b - x_a - 1} + \left[ 1 - \frac{\gamma_2}{\gamma} \right] \left( \frac{\lambda}{u + \lambda + \gamma} \right)^{x_b - 1 - x_a} \quad (10)$$

tomando en cuenta que el caminante arranca desde la posición  $x_b - 1$  con el sistema en estado 1 luego de escapar de la trampa ubicada en  $x_b$ .

**evento 4:** la partícula encuentra la trampa inactiva (estado 2) pero esta se activa antes de que el caminante abandone la posición. En este caso la densidad de probabilidad para el tiempo de atrapamiento resulta

$$A_a(2; t | x_b - 1, 1) = \gamma_2 e^{-(\gamma_2 + \lambda)t} \star P_{2,1}(t) G^{(0)}(x_a; t | x_b - 1) \quad (11)$$

La densidad de probabilidad para el tiempo de atrapamiento en  $x_a$  estará dada por la suma de (10) y (11) convolucionada con la probabilidad de escape al sitio  $x_b - 1$ . Expresado en la representación de Laplace (donde el producto de convolución pasa a ser un simple producto de funciones) esta densidad resulta

$$A_a(u | x_0, j) = G(x_b - 1; u | x_0, j) \times [A_a(1; u | x_b - 1, 1) + A_a(2; u | x_b - 1, 1)] \quad (12)$$

El escape de la región de trampas se produce cuando el caminante llega a la posición  $x_a - 1$ , que sólo

puede alcanzar en el estado 2. La densidad de probabilidad estará dada por el producto de convolución

$$G(x_a - 1, u | x_0, j) = \lambda e^{-(\lambda + \gamma_2)t} \star P_{2,1}(t) G^{(0)}(x_a; t | x_0, j) \quad (13)$$

La probabilidad de escapar de la región se obtiene de evaluar la transformada de Laplace de (13) en  $u = 0$

$$E(x_0; j) = \int_0^\infty dt G(x_a - 1; t | x_0, j) \quad (14)$$

Finalmente obtenemos la probabilidad de escape promediando sobre la condición inicial del ruido. Suponiendo el ruido inicialmente en el estado de equilibrio obtenemos

$$E(x_0, x_b - x_a) = \frac{\gamma_1}{\lambda + \gamma_1} \frac{\gamma_2}{\lambda + \gamma_2} \frac{\lambda^2}{\gamma^2} \times \left\{ 1 - \left( \frac{\lambda}{\lambda + \gamma} \right)^{x_b - x_a - 1} \right\} \quad (15)$$

Encontramos así que la probabilidad de escape, suponiendo el estado inicial de equilibrio para el ruido, no depende de la posición inicial del caminante. Sólo depende de la separación entre las trampas (para trampas contiguas  $x_b - x_a = 1 \Rightarrow E = 0$ ) y por supuesto de los parámetros que regulan las fluctuaciones.

En las figuras 2a y 2b graficamos la probabilidad de escape vs. el cociente  $c = \gamma/\lambda$  de la frecuencia de fluctuaciones y la frecuencia de transiciones en la red. El factor de asimetría indicado corresponde al cociente  $as = \gamma_1/\gamma$  ( $as = 0.5 \Rightarrow \gamma_1 = \gamma_2$  caso simétrico de fluctuaciones). Advertimos que el máximo para la probabilidad de escape se da a un mismo valor del cociente  $c$ , aún cuando el valor de escape en sí depende de la asimetría del proceso de fluctuaciones. Se han considerado dos separaciones diferentes para las trampas mostrando el mismo comportamiento cualitativo aún cuando la posición y valor del pico dependen de este valor.

En la figura 3 ilustramos el comportamiento de la probabilidad de escape en función del cociente  $c$  para distintos valores de la separación entre las trampas y para un valor fijo del factor de asimetría (0.5 correspondiente al caso simétrico). Encontramos aquí una mayor probabilidad de escape para separaciones mayores a la vez que un corrimiento del máximo para valores menores del cociente  $c$  (frecuencias crecientes de fluctuaciones).

Finalmente en la figura 4 ilustramos el valor del cociente  $c$  en función de la separación para el valor máximo de la probabilidad de escape. Encontramos una dependencia más significativa para valores menores de separación, tendiendo a un valor asintótico constante para separaciones mayores.

## 4 Conclusiones

En este trabajo hemos presentado un modelo basado en el esquema de caminatas aleatorias en una red uni-

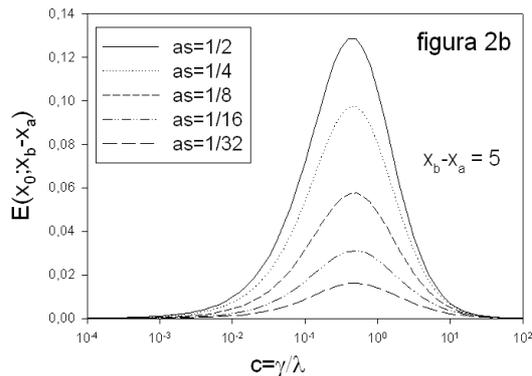
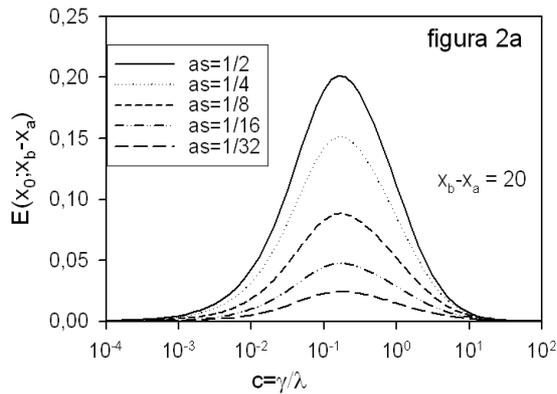


Figura 2: probabilidad de escape en función del cociente de frecuencias para dos separaciones de trampas distintas. En cada figura las distintas curvas corresponden a distintos valores del factor de asimetría en las fluctuaciones:  $as = \gamma_1 / \gamma$ .

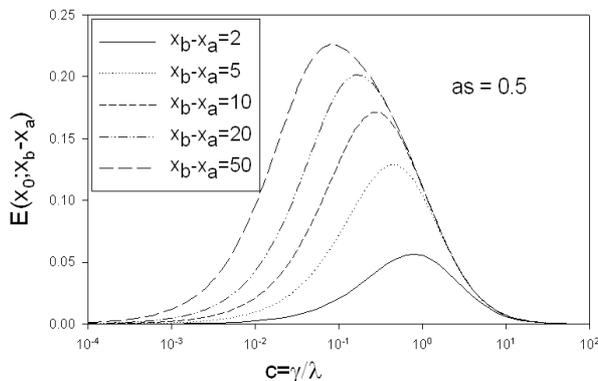


Figura 3: probabilidad de escape en función del cociente de frecuencias para distintos valores de la separación entre trampas. Para esta figura se ha elegido el factor de asimetría  $as = 0.5$  (caso simétrico de fluctuaciones).

dimensional en la cual las partículas que se desplazan pueden ser atrapadas por dos trampas que se activan aleatoriamente y en forma correlacionada. Las escalas de tiempo que caracterizan los desplazamientos en la red y las de las transiciones de los estados de las trampas se definen de manera independiente y pueden ser del mismo orden, lo que permite generalizar las aproximaciones usuales como las de desorden congelado o entorno promedio. La expresión analítica hallada para la

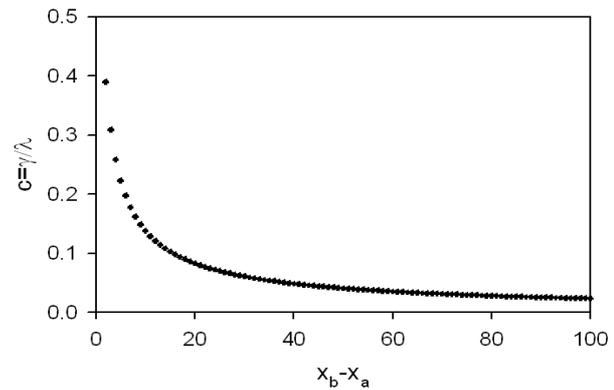


Figura 4: posición del máximo sobre el eje del cociente de frecuencias para la probabilidad de escape.

probabilidad de atravesar la región comprendida entre las trampas muestra un máximo para un dado valor del cociente entre la frecuencias de las fluctuaciones de las trampas y la de las transiciones en la red. Este valor óptimo para la trasmisión corresponde a un mínimo en la probabilidad de atrapamiento por las trampas dando lugar a un fenómeno del tipo "activación resonante". Cuando las trampas fluctúan sin correlación alguna la activación resonante desaparece.

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

## Referencias

- [1] C.R. Doering and J.C. Gadoua, Phys. Rev. Lett., **69**, 2318 (1992).
- [2] A. Bar-Haim and J. Klafter, Phys. Rev. E, **60**, 2554 (1999).
- [3] J.L. Spouge, A. Szabo and G.H. Weis, Phys. Rev. E **54**, 2248 (1996).
- [4] M.A. Ré, C.E. Budde and M.O. Caceres, Phys. Rev. E **54**, 4427 (1996).
- [5] O. Benichou, M. Coppey, M. Moreau, P.H. Suet and R. Voituriez, Phys. Rev. Lett., **94**, 198101 (2005)
- [6] I. Goychuk and P. Hanggi, PhysicaA, **325**, 9(2003).
- [7] A. Harrison and R. Zwanzig, Phys. Rev. A, **32**, 1072 (1985).