



Universidad de Sevilla

Facultad de Física

ESTUDIO DEL MOVIMIENTO BROWNIANO BAJO  
LA ACCIÓN DE RESETEO ESTOCÁSTICO

*Trabajo Fin de Grado*

Autor: Eugenio José Vargas Cabrera

Tutores: Carlos Alberto Plata Ramos y Antonio Prados Montaña

Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear



# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>5</b>
<b>2. Fundamentos de los procesos estocásticos</b>	<b>7</b>
2.1. Definición de proceso estocástico . . . . .	7
2.2. Jerarquía de las funciones de distribución. Probabilidad de transición . . .	8
2.3. Procesos de Markov. La ecuación de Chapman-Kolmogorov . . . . .	10
2.4. Carácter markoviano del movimiento browniano . . . . .	11
2.5. Ecuación maestra . . . . .	12
2.6. Ecuación de Fokker-Planck y su aplicación al movimiento browniano . . . .	15
2.7. Ecuación de Fokker Planck “Backward” . . . . .	18
2.8. Ecuación de Langevin . . . . .	19
<b>3. Reseteo estocástico en procesos difusivos</b>	<b>22</b>
3.1. Difusión con reseteo poissoniano . . . . .	22
3.2. Evolución temporal de la densidad de probabilidad . . . . .	25
3.3. Tiempo de primer paso . . . . .	30
<b>4. Simulación numérica</b>	<b>33</b>
4.1. El método de Monte Carlo . . . . .	33
4.2. Simulaciones para la obtención de la densidad de probabilidad . . . . .	36
4.3. Simulaciones para el tiempo de primer paso . . . . .	39
<b>5. Resumen y conclusiones</b>	<b>41</b>
<b>Anexo I. Código para la simulación de la densidad de probabilidad</b>	<b>44</b>
<b>Anexo II. Código para la simulación del tiempo de primer paso</b>	<b>48</b>



# Capítulo 1

## Introducción

Los procesos de búsqueda están presentes en un sinnúmero de contextos muy diversos. Encontramos procesos de búsqueda tanto en la naturaleza como en el comportamiento humano, así como en las ciencias de la computación. El concepto de búsqueda abarca desde una tarea tan mundana como es encontrar unas llaves perdidas o reconocer a una persona conocida entre la multitud, hasta la exploración del terreno por parte de los animales para la obtención de alimento. En cada situación particular, la búsqueda se manifiesta de una forma distinta. Sin embargo, podemos ver un factor común, y es el de hallar una estrategia de búsqueda óptima, que maximice el cumplimiento del objetivo y/o minimice su coste. Una de las estrategias más intuitivas, y que jugará un papel importante en este trabajo, es la de la búsqueda intermitente. Esta se basa en una mezcla de pasos pequeños en los que se busca activamente, y pasos de mayor rango en los que el buscador se desplaza, pero no busca. Ambas fases del movimiento se suponen sujetas, en general, a un cierto grado de aleatoriedad, lo que hace de especial utilidad emplear el formalismo de la mecánica estadística en la formalización de esta clase de problemas. La implementación del método de búsqueda intermitente, que puede observarse en la naturaleza, ha producido resultados sorprendentemente buenos, permitiendo entender mejor fenómenos de búsqueda modelados mediante modelos sencillos [1]. Estos hechos han provocado que el campo del modelado de problemas de búsqueda, y su correspondiente optimización, haya suscitado un gran interés dentro de la comunidad científica. En particular, nuestro trabajo se encuentra motivado por este contexto, centrándose en el estudio del denominado *reseteo estocástico*.

En este trabajo, se caracterizarán aspectos fundamentales de una partícula browniana

sometida a reseteo estocástico. Con este fin, expondremos en primera instancia algunos conceptos elementales de la teoría de procesos estocásticos en el capítulo 2. Culminaremos dicha exposición con la descripción formal del problema paradigmático de una partícula browniana. En el capítulo 3, nos dedicaremos a desarrollar la teoría de la partícula browniana sujeta a reseteo estocástico de carácter poissoniano. Esto no es otra cosa que considerar que el sistema browniano tiene la posibilidad de realizar, aleatoriamente, excursiones a una posición fija  $x_r$  con una tasa constante  $r$ . Prestaremos especial atención a qué parámetros juegan un papel fundamental en la dinámica y cuáles simplemente definen escalas características. Por otra parte, en el capítulo 4, emplearemos un algoritmo basado en el método de Monte Carlo para simular trayectorias estocásticas, y así comparar las magnitudes del sistema obtenidas de forma numérica con las expresiones analíticas deducidas en el capítulo 3. Para finalizar, resumiremos y expondremos las principales conclusiones de nuestro trabajo en el capítulo 5. Por completitud, se facilitan como anexos los diferentes códigos de MATLAB que se han usado, que han sido desarrollados desde cero, para obtener los resultados numéricos en este trabajo.

# Capítulo 2

## Fundamentos de los procesos estocásticos

Este capítulo está dedicado a introducir de manera resumida los fundamentos de los procesos estocásticos. Tomamos como fuente de inspiración y referencia principal el manual de Van Kampen [2], específicamente sus capítulos I, III, IV, V y VIII. Nuestro objetivo final, que es esencial para el desarrollo de este trabajo, es valernos del concepto de proceso estocástico, así como de su correspondiente formalismo matemático, para introducir el modelo físico de la partícula browniana.

### 2.1. Definición de proceso estocástico

A partir de una variable estocástica (VE)  $X$  podemos generar más variables aleatorias. Dicho de otra forma, una función de una VE es, a su vez, otra VE. Dentro de esa generalidad, podemos definir

$$Y_X(t) = f(X, t), \tag{2.1.1}$$

que es una definición para la VE  $Y$ , que es función de la VE  $X$  y de otra variable no estocástica  $t$ . En el contexto de la física, la variable  $t$  suele referirse al tiempo, y la ecuación (2.1.1) define entonces lo que se conoce como un proceso estocástico. Si sustituimos la VE  $X$  por uno de sus posibles valores  $x$ , obtenemos

$$Y_x(t) = f(x, t), \tag{2.1.2}$$

que es una posible realización<sup>1</sup> del proceso. El proceso estocástico puede entenderse como un colectivo de estas posibles realizaciones. Un ejemplo sencillo de los procesos así definidos es la dinámica determinista de una partícula cuya condición inicial es aleatoria. La posición en un instante  $t$  es aleatoria a través de la aleatoriedad de la condición inicial. La evolución temporal correspondiente a cada condición inicial representa una posible realización del proceso.

Al igual que con una VE “habitual”, independiente del tiempo, podemos determinar los momentos de un proceso estocástico,

$$\langle Y(t) \rangle = \int dx Y_x(t) P_X(x), \quad (2.1.3)$$

donde  $P_X(x)$  es la función densidad de probabilidad de la VE  $X$ . De forma más general, tomando  $n$  valores  $t_1, t_2, \dots, t_n$  para la variable temporal (no necesariamente distintos) podemos construir el momento de orden  $n$ ,

$$\langle Y(t_1)Y(t_2) \dots Y(t_n) \rangle = \int dx Y_x(t_1)Y_x(t_2) \dots Y_x(t_n) P_X(x). \quad (2.1.4)$$

Como es habitual, las integrales en que no se especifican los límites se entienden extendidas a todo el rango de la variable de integración.

## 2.2. Jerarquía de las funciones de distribución. Probabilidad de transición

La distribución de probabilidad de la VE  $Y$  en el instante  $t$  puede ser deducida por medio de la regla de transformación de variables a partir de la distribución de probabilidad de  $X$ , obteniéndose

$$P_1(y, t) = \int dx \delta [y - Y_x(t)] P_X(x), \quad (2.2.1)$$

donde el subíndice 1 remarca el número de variables de las que depende  $P$ , esto es, el número de tiempos de observación. De manera similar, podemos construir la densidad de probabilidad conjunta de que  $Y_X(t)$  tome valores  $y_1, y_2, \dots, y_n$  en los instantes de tiempo  $t_1, t_2, \dots, t_n$  respectivamente,

$$P_n(y_1, t_1; y_2, t_2; \dots; y_n, t_n) = \int dx \prod_{i=1}^n \delta [y_i - Y_x(t_i)] P_X(x), \quad (2.2.2)$$

---

<sup>1</sup>Es frecuente emplear también en su lugar el término “trayectoria”.

obteniendo así una jerarquía infinita de distribuciones de probabilidad  $P_n$  ( $n = 1, 2, \dots$ ). Esta jerarquía de distribuciones nos permite calcular cualquier valor medio deseado, por ejemplo,

$$\langle Y(t_1)Y(t_2)\dots Y(t_n) \rangle = \int dy_1 dy_2 \dots dy_n y_1 y_2 \dots y_n P_n(y_1, t_1; y_2, t_2; \dots; y_n, t_n), \quad (2.2.3)$$

que es una manera alternativa totalmente equivalente de obtener los momentos de la ecuación (2.1.4).

La jerarquía de funciones de distribución  $P_n$  cumple las cuatro condiciones de consistencia siguientes:

1.  $P_n(y_1, t_1; y_2, t_2; \dots; y_n, t_n) \geq 0$ , lo que es cierto para las densidades de probabilidad por definición.
2.  $P_n(y_1, t_1; y_2, t_2; \dots; y_n, t_n)$  es invariante ante el intercambio de dos pares de valores  $(y_k, t_k)$  y  $(y_l, t_l)$ , para cualquier par  $(k, l)$ .
3.  $\int dy_n P_n(y_1, t_1; y_2, t_2; \dots; y_n, t_n) = P_{n-1}(y_1, t_1; y_2, t_2; \dots; y_{n-1}, t_{n-1})$ .
4.  $\int dy_1 P_1(y_1, t_1) = 1$ .

Kolmogorov demostró que cualquier conjunto de funciones que cumpliera estas cuatro condiciones define unívocamente un proceso estocástico  $Y(t)$ , definido en la forma dada por la ecuación (2.1.1). Por lo tanto, la jerarquía de densidades de probabilidad conjunta constituye una forma equivalente de definir un proceso estocástico a la ya vista en la sección anterior. Cabe puntualizar que, debido a la tercera condición de consistencia, un número finito de  $P_n$  pueden ser omitidas de la jerarquía sin ello suponer una pérdida de información, esto es, dada una  $P_N$ , se conocen todas las  $P_n$  con  $n < N$ .

Desde un punto de vista físico, si un sistema está sujeto en su evolución a algún grado de aleatoriedad, su estado en todo instante de tiempo define en esencia un proceso estocástico, en la medida que tenemos un colectivo compuesto por las diferentes realizaciones posibles de la dinámica. Si medimos  $y_1$  en el instante de tiempo  $t_1$ , es interesante considerar la probabilidad de medir  $y_2$  en el instante de tiempo  $t_2$ . Esta probabilidad es denotada como  $dy_2 P_{1|1}(y_2, t_2|y_1, t_1)$ , y se denomina probabilidad de transición y obedece la denominada regla de Bayes,

$$P_{1|1}(y_2, t_2|y_1, t_1) = \frac{P_2(y_1, t_1; y_2, t_2)}{P_1(y_1, t_1)}, \quad (2.2.4)$$

donde la notación  $n|m$  indica que estamos estudiando cómo se distribuye la densidad de probabilidad de las  $n$  primeras variables, siendo conocido el valor de las  $m$  restantes, que

actúan como condiciones. El significado de esta probabilidad condicionada es bastante intuitivo. Mide cuál es la fracción de todas las realizaciones del proceso que, pasando por el estado  $y_1$  en el instante  $t_1$ , pasan además por el estado  $y_2$  en el instante  $t_2$ . Al ser la probabilidad condicionada una distribución de probabilidad, necesariamente es no negativa y está convenientemente normalizada,

$$\int dy_2 P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) = 1, \quad (2.2.5)$$

lo que puede deducirse integrando la ecuación (2.2.4) y aplicando directamente la tercera propiedad de la jerarquía de funciones de distribución para  $n = 2$ .

De manera más general, podemos fijar distintos valores de  $Y$  en  $k$  instantes de tiempo  $t_1, t_2, \dots, t_k$  y preguntarnos por la probabilidad de obtener los  $l$  valores siguientes en los instantes  $t_{k+1}, \dots, t_{k+l}$ , lo que nos lleva a la regla general de Bayes de la probabilidad condicionada,

$$P_{l|k}(y_{k+l}, t_{k+l}; \dots; y_{k+1}, t_{k+1} | y_k, t_k; \dots; y_1, t_1) = \frac{P_{k+l}(y_{k+l}, t_{k+l}; \dots; y_k, t_k; \dots; y_1, t_1)}{P_k(y_k, t_k; \dots; y_1, t_1)}. \quad (2.2.6)$$

## 2.3. Procesos de Markov. La ecuación de Chapman-Kolmogorov

Vamos a centrarnos en una subclase de procesos estocásticos que son importantes en física. Estos son los procesos de Markov: un proceso de Markov (o markoviano) es un proceso estocástico que cumple la propiedad de Markov<sup>2</sup>

$$P_{1|n-1}(y_n, t_n | y_{n-1}, t_{n-1}; \dots; y_1, t_1) = P_{1|1}(y_n, t_n | y_{n-1}, t_{n-1}), \quad (2.3.1)$$

es decir, que la probabilidad de transición a un estado  $y_n$  depende únicamente del estado inmediatamente anterior  $y_{n-1}$ , y no se ve afectada por el conocimiento de valores anteriores. Por esta misma razón, los procesos de Markov son también denominados como procesos sin memoria. Esta situación particular nos permite obtener toda la jerarquía de distribuciones de probabilidad a partir de las funciones  $P_1$  y  $P_{1|1}$ . Por ejemplo, para la

---

<sup>2</sup>A partir de ahora, estamos siempre suponiendo una secuencia de tiempos ordenados,  $t_1 < t_2 < \dots < t_n$ , abandonando la idea general de que varios instantes de tiempo podían ser iguales.

secuencia conformada por tres instantes de tiempo tenemos

$$\begin{aligned} P_3(y_3, t_3; y_2, t_2; y_1, t_1) &= P_2(y_2, t_2; y_1, t_1) P_{1|2}(y_3, t_3 | y_2, t_2; y_1, t_1) \\ &= P_1(y_1, t_1) P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) P_{1|1}(y_3, t_3 | y_2, t_2). \end{aligned} \quad (2.3.2)$$

Si continuamos este procedimiento sucesivamente, se pueden hallar todas las funciones de distribución  $P_n$ .

Integrando la ecuación (2.3.2) sobre la variable  $y_2$ ,

$$P_2(y_3, t_3; y_1, t_1) = P_1(y_1, t_1) \int dy_2 P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) P_{1|1}(y_3, t_3 | y_2, t_2), \quad (2.3.3)$$

dividiendo por  $P_1(y_1, t_1)$  y teniendo en cuenta la ecuación (2.2.6) para el miembro de la izquierda obtenemos

$$P_{1|1}(y_3, t_3 | y_1, t_1) = \int dy_2 P_{1|1}(y_3, t_3 | y_2, t_2) P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1), \quad (2.3.4)$$

que es conocida como la ecuación de Chapman-Kolmogorov. Esta ecuación es esencialmente una condición de consistencia que debe respetar un proceso estocástico para ser markoviano, y describe que la probabilidad de pasar de un estado  $y_1$  en  $t_1$  a un estado  $y_3$  en  $t_3$  es la suma de las probabilidades de esto ocurriendo vía todos los posibles estados  $y_2$  en el tiempo intermedio  $t_2$ . Para establecer esta propiedad con claridad, es importante haber establecido al principio de esta sección un orden de tiempos, esto es, aquí  $t_1 < t_2 < t_3$ .

## 2.4. Carácter markoviano del movimiento browniano

Los conceptos de teoría de procesos estocásticos desarrollados hasta este punto de la memoria han sido introducidos por su estrecha conexión con el movimiento browniano, que es el fenómeno físico en el que se centra este trabajo. El movimiento browniano es un movimiento aleatorio que recibe su nombre en honor de Robert Brown, primer científico en reportar su observación en 1827. El ejemplo paradigmático de movimiento browniano es el realizado por una partícula inmersa en un fluido conformado por partículas más ligeras que colisionan con ella de forma continua y aleatoria. Como consecuencia de ello, la velocidad de la partícula browniana sufre muchos cambios bruscos pero pequeños en magnitud, por lo cual parece intuitivo afirmar que tanto la posición como la velocidad de la partícula browniana constituyen procesos estocásticos. Sin embargo, llegados a este punto, es interesante analizar si la posición y/o la velocidad de la partícula browniana

tienen carácter markoviano, a fin de utilizar el marco teórico anteriormente introducido para la descripción del proceso físico de una manera justificada.

Supongamos en primer lugar una escala de tiempo que nos permite realizar una serie de medidas de la velocidad de la partícula. Para facilitar la discusión, se considerará el problema monodimensional. Cuando la partícula viaja en una determinada dirección con velocidad  $V$ , esta sufrirá en promedio más colisiones en la dirección de movimiento que en la opuesta, por lo tanto la probabilidad de que se produzca una variación de la velocidad  $\Delta V$  en el siguiente intervalo de tiempo  $\Delta t$  depende de  $V$ , pero no de la velocidad en instantes de tiempo anteriores. Esto nos lleva a afirmar que, en dicha escala de tiempo, la velocidad de la partícula browniana constituye un proceso de Markov.

Sin embargo, las observaciones experimentales del movimiento de la partícula browniana no parecían corresponderse con la descripción del movimiento detallada en el párrafo anterior. Según Einstein y Smoluchowski, esto se debía a que entre dos registros experimentales sucesivos de la posición se habían producido un número enorme de cambios en la velocidad de la partícula. Dicho de otra manera, la escala de tiempo del registro experimental de la posición de la partícula era más gruesa que aquella en la que se producen los cambios de velocidad, dando tiempo a esta a realizar numerosas excursiones entre medida y medida. Este razonamiento permite afirmar que los distintos desplazamientos observados son independientes entre sí, dotando a la posición de un carácter markoviano, eso sí, sobre una escala de tiempo mayor que la de la velocidad. En esta escala de tiempo, la velocidad instantánea “real” de la partícula no juega ningún papel ya que, entre dos posiciones, ha tomado un sinnúmero de valores dispares.

Entender este último aspecto es fundamental, ya que un proceso puede o no considerarse de Markov dependiendo de la variable de interés y de la escala temporal sobre la que estemos trabajando.

## 2.5. Ecuación maestra

Si bien la ecuación de Chapman-Kolmogorov (2.3.4) permite caracterizar un proceso de Markov, se trata de una ecuación integral que es difícil de tratar. Por ello, en su lugar usaremos la ecuación maestra, que es una ecuación diferencial equivalente pero más fácil de manejar y relacionar de forma directa con procesos físicos concretos. Para obtenerla,

estudiaremos la ecuación de Chapman-Kolmogorov en el límite en que la diferencia de tiempos  $dt$  es pequeña.

Partimos pues de la ecuación (2.3.4), haciendo los cambios de notación  $y_3 \rightarrow y$ ,  $t_3 \rightarrow t + dt$ ;  $y_2 \rightarrow y'$ ,  $t_2 \rightarrow t$ ;  $y_1 \rightarrow y_0$ ,  $t_1 \rightarrow t_0$  tenemos

$$P_{1|1}(y, t + dt|y_0, t_0) = \int dy' P_{1|1}(y, t + dt|y', t) P_{1|1}(y', t|y_0, t_0). \quad (2.5.1)$$

Considerando que  $dt$  es pequeño, el primer término del miembro de la derecha de (2.5.1) se puede desarrollar en serie de Taylor,

$$P_{1|1}(y, t + dt|y', t) = P_{1|1}(y, t|y', t) + dt \left. \frac{\partial P_{1|1}(y, t'|y', t)}{\partial t'} \right|_{t'=t} + \mathcal{O}(dt^2), \quad (2.5.2)$$

y truncar el sumatorio al primer orden en  $dt$ . El segundo término del miembro derecho de la ecuación (2.5.2) tiene dos posibles interpretaciones dependiendo del par  $(y, y')$ :

1. Si  $y \neq y'$  entonces  $\left. \frac{\partial P_{1|1}(y, t'|y', t)}{\partial t'} \right|_{t'=t}$  representa la probabilidad de transición por unidad de tiempo del estado  $y'$  al estado  $y$ , que representaremos con la notación  $W(y|y')$ .
2. Si, por el contrario,  $y = y'$  entonces  $\left. \frac{\partial P_{1|1}(y, t'|y, t)}{\partial t'} \right|_{t'=t}$  es la probabilidad por unidad de tiempo del estado  $y'$  para migrar al resto de estados accesibles del sistema. Matemáticamente se puede representar en términos de la probabilidad de transición como  $-\int dy'' W(y''|y')$ .

Teniendo esto en cuenta, podemos reescribir la derivada parcial como

$$\left. \frac{\partial P_{1|1}(y, t'|y', t)}{\partial t'} \right|_{t'=t} = W(y|y') - \delta(y - y') \int dy'' W(y''|y'), \quad (2.5.3)$$

e introducirlo en la ecuación (2.5.2). Además, como  $P_{1|1}(y, t|y', t) = \delta(y - y')$  resulta que podemos escribir de forma alternativa

$$P_{1|1}(y, t + dt|y', t) = \delta(y - y') \left( 1 - dt \int dy'' W(y''|y') \right) + dt W(y|y'), \quad (2.5.4)$$

cuyos términos admiten una interpretación clara:

1.  $dt W(y|y')$  es la probabilidad de migrar al estado  $y$  partiendo del estado  $y'$  en el intervalo de tiempo  $dt$ .
2.  $1 - dt \int dy'' W(y''|y')$  es entonces la probabilidad de permanecer en el estado  $y'$  en el mismo intervalo de tiempo, ya que esas son las dos situaciones posibles.

Sustituyendo la ecuación (2.5.4) en (2.5.1), realizando las integrales de las deltas y teniendo en cuenta que

$$\frac{\partial P_{1|1}(y, t|y_0, t_0)}{\partial t} = \frac{P_{1|1}(y, t + dt|y_0, t_0) - P_{1|1}(y, t|y_0, t_0)}{dt},$$

se alcanza la ecuación maestra

$$\frac{\partial P_{1|1}(y, t|y_0, t_0)}{\partial t} = \int dy' [W(y|y')P_{1|1}(y', t|y_0, t_0) - W(y'|y)P_{1|1}(y, t|y_0, t_0)], \quad (2.5.5)$$

que es una ecuación de pérdida y ganancia de probabilidad. Esta ecuación viene complementada por la condición inicial  $P_{1|1}(y, t_0|y_0, t_0) = \delta(y - y_0)$ .

No obstante, es habitual encontrar la ecuación maestra (2.5.5) escrita para la  $P_1$  en vez de para la  $P_{1|1}$ , esto es,

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \int dy' [W(y|y')P(y', t) - W(y'|y)P(y, t)], \quad (2.5.6)$$

donde por brevedad prescindimos del subíndice de la distribución  $P_1$ . Dada la ecuación (2.5.5), la ecuación (2.5.6) es una consecuencia directa al introducir la regla de Bayes (2.2.4) e integrar para todo  $y_0$ . La condición inicial para la ecuación maestra escrita para  $P_1(y, t)$  ya no es una delta de Dirac sino una función arbitraria  $P_1(y, t_0) = P_0(y)$ , que indica la distribución inicial de la VE  $Y$  en el sistema físico bajo estudio.

Hemos presentado el marco teórico de procesos estocásticos en el contexto de sistemas cuyos estados forman un continuo. También es posible estudiar, de modo análogo, sistemas con estados discretos. En ese caso, denotamos por  $p_n(t)$  a la probabilidad de que el sistema esté en el estado discreto  $n$  en el tiempo  $t$ . La ecuación maestra presenta la forma

$$\frac{dp_n(t)}{dt} = \sum_{n'} \{W_{nn'} p_{n'}(t) - W_{n'n} p_n(t)\}, \quad (2.5.7)$$

donde la estructura de ecuación de pérdida y ganancia de probabilidad es aún más evidente. Nótese que el subíndice  $nn'$  indica que se viaja desde el estado de partida  $n'$  hasta el de llegada  $n$ . La ecuación maestra no es más que la ecuación de continuidad para la probabilidad, que rige la evolución de un sistema gobernado por leyes estocásticas. El primer término del miembro de la derecha de (2.5.7) representa el ingreso de probabilidad en el estado  $n$  desde el resto de estados posibles  $n'$ , y el segundo término es la pérdida de probabilidad del estado  $n$  al resto de estados  $n'$ . Los casos en los que  $n' = n$  en el sumatorio se anulan.

## 2.6. Ecuación de Fokker-Planck y su aplicación al movimiento browniano

La ecuación de Fokker-Planck, que será el punto de partida en la mayoría de situaciones estudiadas en este trabajo, puede obtenerse como un caso límite de la ecuación maestra para describir procesos de Markov “continuos”. En estos procesos, los posibles saltos de la VE  $Y$  son “pequeños”, es decir, la probabilidad de transición es no nula solo entre estados que están muy cerca. Para deducir la ecuación de Fokker-Planck, precisamos de realizar algunas manipulaciones e hipótesis previas:

1. Expresamos la probabilidad de transición por unidad de tiempo entre los estados  $y$  e  $y'$  como una función del estado de partida  $y'$  y de la amplitud o tamaño del salto, es decir,

$$W(y|y') = W(y'; r), \quad r = y - y'. \quad (2.6.1)$$

2. Asumimos que sólo son probables las transiciones de pequeña amplitud. Esto es, la probabilidad de transición  $W(y'; r)$  es una función picuda en torno a  $r = 0$ , pero tiene una dependencia suave con  $y'$ . Matemáticamente esto se puede expresar como que existe un  $\delta > 0$  tal que,

$$W(y'; r) \approx 0, \quad \text{si } |r| > \delta, \quad (2.6.2)$$

$$W(y' + \Delta y; r) \approx W(y'; r), \quad \text{si } |\Delta y| < \delta. \quad (2.6.3)$$

3. Por último, consideramos que la solución  $P(y, t)$  en la que estamos interesados también tiene una dependencia suave con  $y$ , en el mismo sentido de la ecuación (2.6.3).

Teniendo en cuenta la ecuación (2.6.1), podemos reescribir la ecuación maestra (2.5.6) y desarrollar hasta el segundo término del desarrollo de Taylor en torno a  $y' = y$ , o equivalentemente  $r = 0$ ; tras algunas manipulaciones se obtiene la ecuación de Fokker-Planck

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial y} [a_1(y)P(y, t)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} [a_2(y)P(y, t)], \quad (2.6.4)$$

donde

$$a_\nu(y) = \int_{-\infty}^{+\infty} dr r^\nu W(y; r) \quad (2.6.5)$$

se denomina momento de salto de orden  $\nu$  por unidad de tiempo.

Es habitual escribir la ecuación (2.6.4) expresando los momentos de salto por unidad de tiempo como  $A(y) \equiv a_1(y)$  y  $B(y) \equiv a_2(y)$ , es decir,

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial y} [A(y)P(y, t)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} [B(y)P(y, t)]. \quad (2.6.6)$$

Al primer término de la ecuación (2.6.6) se le suele denominar término de transporte, convección o deriva, mientras que el segundo término suele ser conocido como término de difusión o fluctuación. La ecuación de Fokker-Planck también gobierna la evolución de la probabilidad de transición  $P_{1|1}(y, t|y_0, t_0)$  tomando como variables  $(y, t)$ , fijadas  $(y_0, t_0)$ . Por ello, a menudo se le denomina ecuación Fokker-Planck “Forward”, ya que describe la evolución hacia delante en el tiempo.

Al igual que veíamos con la ecuación maestra, la ecuación (2.6.6) no es más que una ecuación de continuidad o de conservación de la probabilidad, lo que se hace más evidente si la reescribimos como

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = -\frac{\partial J(y, t)}{\partial y}, \quad (2.6.7)$$

$$J(y, t) = A(y)P(y, t) - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial y} [B(y)P(y, t)], \quad (2.6.8)$$

donde  $J(y, t)$  es la corriente de probabilidad. Si integramos a ambos lados de (2.6.7) en todo el rango de  $y$ , obtenemos la forma integral de la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{+\infty} dy P(y, t) = J(-\infty, t) - J(+\infty, t). \quad (2.6.9)$$

Salvo que se diga lo contrario, consideraremos que el rango de  $y$  es todo  $\mathbb{R}$ . Para completar del todo la definición del problema, debemos concretar las condiciones de contorno. Mientras que no se explicita de otra forma, consideraremos las denominadas condiciones de contorno naturales,  $J(-\infty, t) = J(+\infty, t) = 0$ ,  $\forall t$ . Aseguramos así que no hay sumideros ni fuentes de probabilidad en los bordes y, por tanto, garantizamos la conservación de la probabilidad en todos los instantes de tiempo.

La ecuación de Fokker-Planck (2.6.6) presenta principalmente dos ventajas frente a la ecuación maestra (2.5.5). La primera es que es una ecuación diferencial para la probabilidad en lugar de una ecuación integro-diferencial y, si bien sólo se puede encontrar la solución explícita en algunos casos concretos, sigue siendo mucho más sencilla de tratar. La segunda es que no es necesario el conocimiento de la probabilidad de transición  $W(y|y')$ , lo que involucraría en la práctica un conocimiento profundo del proceso estocástico subyacente. Por el contrario, basta con conocer las funciones  $A(y)$  y  $B(y)$ , que como

veremos a continuación, se pueden deducir a partir del conocimiento fenomenológico del sistema físico concreto que estudiemos.

Supongamos que tenemos una magnitud física  $Y$  que evoluciona siguiendo un proceso de Markov. Tomemos un intervalo de tiempo pequeño para que esta magnitud no pueda cambiar mucho en  $dt$ , pero lo suficientemente grande como para que se cumpla la propiedad de Markov (2.3.1). En este intervalo de tiempo, su valor cambiará en una cierta cantidad  $\Delta y$ , que es aleatoria. Por tanto, se pueden construir los primeros  $n$  momentos de salto como

$$\langle (\Delta y)^n \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dy (y - y_0)^n P_{1|1}(y, t_0 + dt | y_0, t_0), \quad (2.6.10)$$

donde  $y_0$  representa el estado en el que se encuentra el sistema en el instante  $t_0$  y desde el que se produce la transición. Admitiendo que la probabilidad de transición  $P_{1|1}$  verifica la ecuación de Fokker-Planck, desarrollando en serie de Taylor hasta primer orden en  $dt$  como en la ecuación (2.5.4), y evaluando las integrales, llegamos a que

$$\langle \Delta y \rangle = A(y_0) dt, \quad \langle (\Delta y)^2 \rangle = B(y_0) dt. \quad (2.6.11)$$

De esta manera, la información del sistema en un intervalo de tiempo pequeño  $dt$  nos sirve para determinar los coeficientes  $A(y)$  y  $B(y)$ . La ecuación de Fokker-Planck así obtenida, rige la evolución del sistema para cualquier tiempo. Podemos entender esta conexión entre el comportamiento para tiempos cortos y largos como una consecuencia del carácter markoviano del sistema.

Utilizaremos ahora el marco teórico desarrollado para afrontar el problema del movimiento browniano. Comenzamos estudiando el movimiento browniano sobre una escala de tiempo tal que la posición de la partícula browniana puede considerarse como un proceso de Markov. Por simplicidad, estudiamos el problema en el caso monodimensional, y denotamos mediante  $X$  a la posición de la partícula browniana. La partícula está inmersa en un fluido en equilibrio a la temperatura  $T$ , de manera que en ausencia de campo externo la distribución de los posibles desplazamientos  $\Delta X$  (i) no depende de su posición  $X$  (homogeneidad), y (ii) es simétrica alrededor de  $\Delta X = 0$  (isotropía). Por tanto, tenemos que

$$\langle \Delta X \rangle = 0, \quad \langle (\Delta X)^2 \rangle = \text{cte}, \quad (2.6.12)$$

por lo que, empleando la ecuación (2.6.11), deducimos que

$$A(x) = 0; \quad B(x) = B_0. \quad (2.6.13)$$

Sustituyendo estos resultados en la ecuación (2.6.6), resulta

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \frac{B_0}{2} \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}, \quad (2.6.14)$$

que es la ecuación de Fokker-Planck para el movimiento browniano. Incluso sin resolver la ecuación podemos extraer una conclusión importante, y es que la ecuación (2.6.14) presenta la misma forma que la ecuación de difusión [3], habitual en el contexto de la física macroscópica,

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \Theta}{\partial x^2}, \quad (2.6.15)$$

donde  $D$  es el coeficiente de difusión y  $\Theta$  la concentración de la sustancia. Que exista esta equivalencia es razonable, ya que el movimiento browniano de una partícula dentro de un fluido es realmente un proceso de difusión, y por tanto, ambos fenómenos están regidos por la misma ecuación. En consecuencia, existe una relación directa entre los coeficientes de las ecuaciones (2.6.14) y (2.6.15),

$$B_0 = 2D. \quad (2.6.16)$$

Recordando además que  $B_0$  está expresado en términos microscópicos mediante la ecuación (2.6.11), llegamos a la primera relación de Einstein para el movimiento browniano [4]

$$D = \frac{\langle (\Delta X)^2 \rangle}{2\Delta t}, \quad (2.6.17)$$

que relaciona la constante macroscópica y experimental  $D$  con los saltos microscópicos de la partícula. La conexión con la ecuación de difusión, permite llegar a una forma final de la ecuación de Fokker-Planck para el movimiento browniano

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}. \quad (2.6.18)$$

Este será el modelo básico que utilizaremos en nuestro trabajo, al cual se le añadirá un ingrediente adicional: el concepto de reseteo estocástico.

## 2.7. Ecuación de Fokker Planck “Backward”

También es posible deducir la denominada ecuación de Fokker-Planck “Backward”, que no es más que una ecuación diferencial para la probabilidad, pero donde se toman como las variables del problema la posición y tiempo iniciales. Se puede obtener esta ecuación

de diversas maneras, aquí lo haremos a partir de la ecuación de Chapman-Kolmogorov (2.3.4). Derivando toda la expresión respecto al tiempo intermedio  $t_1$  obtenemos

$$\frac{\partial P_{1|1}(y, t|y_0, t_0)}{\partial t_1} = \frac{\partial}{\partial t_1} \int dy_1 P_{1|1}(y, t|y_1, t_1) P_{1|1}(y_1, t_1|x_0, t_0). \quad (2.7.1)$$

La derivada en el miembro derecho de (2.7.1) puede entrar dentro de la integral, dando lugar a

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_{1|1}(y, t|y_0, t_0)}{\partial t_1} = \int dy_1 \left[ \frac{\partial P_{1|1}(y, t|y_1, t_1)}{\partial t_1} P_{1|1}(y_1, t_1|y_0, t_0) \right. \\ \left. + P_{1|1}(y, t|y_1, t_1) \frac{\partial P_{1|1}(y_1, t_1|y_0, t_0)}{\partial t_1} \right]. \end{aligned} \quad (2.7.2)$$

Teniendo en cuenta que  $P_{1|1}$  cumple la ecuación de Fokker-Planck “Forward”, podemos sustituir la ecuación (2.6.6) en (2.7.2) e integrar por partes, considerando las condiciones de contorno pertinentes. Por último sólo restaría hacer tender  $t_1$  a  $t_0$ , llegando finalmente a la ecuación de Fokker-Planck “Backward”

$$- \frac{\partial P_{1|1}(y, t|y_0, t_0)}{\partial t_0} = A(y_0) \frac{\partial P_{1|1}(y, t|y_0, t_0)}{\partial y_0} + \frac{1}{2} B(y_0) \frac{\partial^2 P_{1|1}(y, t|y_0, t_0)}{\partial y_0^2}. \quad (2.7.3)$$

La ecuación (2.7.3) será de utilidad en el siguiente capítulo cuando introduzcamos los conceptos de probabilidad de supervivencia y tiempo de primer paso, dos magnitudes de gran interés a la hora de estudiar el problema de primer paso en procesos estocásticos.

## 2.8. Ecuación de Langevin

Desde el comienzo de este trabajo, nos hemos concentrado en tratar de caracterizar un proceso estocástico por medio de su densidad de probabilidad  $P(y, t)$  asociada. Encontramos que esta distribución, en el caso de procesos de Markov continuos, debe cumplir la denominada ecuación de Fokker-Planck (2.6.6), donde las funciones  $A(y)$  y  $B(y)$  se concretan para una situación física particular. Sin embargo, cabe preguntarse si existe algún tipo de ecuación diferencial para el propio proceso de Markov  $Y(t)$ . La respuesta corta es que sí existe dicha ecuación, solo que no en el sentido habitual de ecuación diferencial. Este es el fundamento de un marco teórico relativamente nuevo de las matemáticas, que se denomina teoría de ecuaciones diferenciales estocásticas [5].

Una forma de deducirla, es estudiar la VE de salto  $\Delta y = Y(t + dt) - Y(t)$  en el límite  $dt \rightarrow 0$ . Sin ahondar en el tecnicismo, nos restringiremos aquí a dar la conexión entre la

descripción para distribuciones y la descripción de ecuación diferencial estocástica, que puede encontrarse por ejemplo en el capítulo 3 del manual de Gillespie [6]. En particular, usaremos el formato en diferencias discretas, es decir evitaremos escribir la derivada de forma explícita cuando escribamos la ecuación diferencial estocástica. La descripción en forma de ecuación en diferencias de un proceso estocástico que verifica la ecuación de Fokker Planck anteriormente deducida se reduce a

$$dy = \xi (Bdt)^{1/2} + A(y)dt, \quad (2.8.1)$$

donde nos estamos restringiendo al caso en que  $B$  no depende de  $y$ , como sucede en la difusión.<sup>3</sup> La ecuación (2.8.1) puede reescribirse

$$y(t + dt) = y(t) + \xi (Bdt)^{1/2} + A(y)dt, \quad (2.8.2)$$

donde  $\xi$  es una VE gaussiana con valor medio nulo y varianza unidad. La ecuación (2.8.2) se denomina ecuación de Langevin, y constituye una forma equivalente de definir el proceso de Markov continuo  $Y(t)$  a la ecuación de Fokker-Planck (2.6.6). En el caso difusivo, (2.8.2) adopta la forma

$$x(t + dt) = x(t) + \xi(Ddt)^{1/2}. \quad (2.8.3)$$

Dado que hemos planteado la ecuación de una forma algo heurística, vamos a comprobar que efectivamente podemos reobtener la ecuación de Fokker-Planck partiendo de la ecuación (2.8.3). En concreto, expresamos la probabilidad en el instante  $t + dt$  como

$$P(x, t + dt) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi P_{\Xi}(\xi) P(x - \xi(Ddt)^{1/2}, t), \quad (2.8.4)$$

donde se promedia sobre todas las posibles valores de la VE  $\xi$ , a través de su distribución  $P_{\Xi}$ . Realizando un desarrollo de Taylor en  $(dt)^{1/2}$ ,

$$P(x, t + dt) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi P_{\Xi}(\xi) \left[ P(x, t) - (Ddt)^{1/2} \xi \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} + Ddt \frac{\xi^2}{2} \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} + \dots \right], \quad (2.8.5)$$

que en el límite  $dt \rightarrow 0$  nos permite recuperar la ecuación de Fokker-Planck difusiva (2.6.14), lo que conecta los dos enfoques del problema.

---

<sup>3</sup>Cuando  $B$  depende de  $y$ , la conexión entre las ecuaciones de Langevin y Fokker-Planck es más sutil, pero esta sutileza no es necesaria para nuestro trabajo.

La ecuación de Langevin será empleada en el apartado de simulaciones numéricas, debido a que constituye una forma directa de construir trayectorias de un proceso de Markov continuo y, por lo tanto, de estimar los momentos de dicho proceso, así como su densidad de probabilidad.

# Capítulo 3

## Reseteo estocástico en procesos difusivos

Una vez establecidos los aspectos más fundamentales de la dinámica browniana, vamos a considerar un ingrediente adicional que actuará sobre la partícula difusiva. Este es el reseteo estocástico. Como su nombre indica, el reseteo consiste en regresar a un estado concreto cada cierto tiempo. Por simplicidad, tomaremos que el reseteo sucede de forma instantánea. La frecuencia con la que se producen estos eventos de reseteo es aleatoria, y sigue una cierta distribución de probabilidad. En este trabajo, vamos a concentrarnos en el caso en el que esta distribución sea poissoniana, esto es el ritmo de reseteo es constante en el tiempo, siguiendo los primeros trabajos de Evans y Majumdar [7], que sentaron las bases del reseteo estocástico.

### 3.1. Difusión con reseteo poissoniano

Consideramos el problema de la dinámica de una partícula browniana monodimensional con posición inicial  $x_0$  en el instante  $t_0 = 0$  y coeficiente de difusión  $D$ . Añadimos a este modelo la posibilidad de reiniciar la posición a un punto fijo  $x_r$ .<sup>1</sup> Dicho reseteo aleatorio sucede a un ritmo con una tasa constante  $r$ . El problema de difusión con reseteo poissoniano constituyó el primer modelo con reseteo estocástico en un marco teórico moderno en el contexto de procesos estocásticos. Esta primera semilla ha motivado en la actualidad

---

<sup>1</sup>En principio  $x_0$  y  $x_r$  pueden ser distintos, pero por simplicidad en los cálculos será conveniente establecerlos iguales más adelante.

multitud de generalizaciones y aplicaciones [8].

En esta situación, la posición de la partícula en un instante  $t$ ,  $x(t)$ , puede actualizarse en un pequeño intervalo de tiempo  $dt$  a

$$\begin{aligned} x(t + dt) &= x_r, \quad \text{con probabilidad } r dt, \\ &= x(t) + \xi(Ddt)^{1/2}, \quad \text{con probabilidad } (1 - r dt). \end{aligned} \quad (3.1.1)$$

La densidad de probabilidad para la partícula de estar en la posición  $x$  en el instante  $t$ , comenzando inicialmente en  $x_0$  en el instante  $t_0 = 0$ , y con reseteo a la posición  $x_r$ , puede escribirse como  $P_{1|1}(x, t|x_0; x_r)$ . Por brevedad en la notación introduciremos la ecuación de evolución para la probabilidad a un tiempo  $P(x, t)$ , la equivalente a la ecuación (2.6.6), en lugar de para la probabilidad condicionada. Cuando el contexto sea lo suficientemente claro, omitiremos la dependencia con  $x_0$  y  $x_r$ .

La ecuación de evolución para  $P(x, t)$  se puede obtener fácilmente a partir de la ecuación (3.1.1) promediando sobre los posibles eventos en el intervalo  $dt$ , lo que conduce a

$$\begin{aligned} P(x, t + dt) &= rdt \delta(x - x_r) \int_{-\infty}^{+\infty} dx' P(x', t) \\ &+ (1 - rdt) \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi P_{\Xi}(\xi) P(x - \xi(Ddt)^{1/2}, t). \end{aligned} \quad (3.1.2)$$

El primer término del miembro de la derecha indica que, si el reseteo ocurre, la posición de la partícula será  $x_r$ , con independencia de la posición en la que estuviera. Adicionalmente, el factor de la integral de  $P$ , sería innecesario (por ser idénticamente igual a la unidad) al considerar condiciones de contorno naturales. Sin embargo, dicha integral es indispensable al considerar condiciones de contorno absorbentes, ya que sólo las partículas que han evitado ser absorbidas continúan evolucionando. El segundo término, contribuye con una integral sobre todas las posiciones desde las que ha podido difundirse la partícula hacia la posición  $x$  en el último intervalo  $dt$ , como sucedía en la ecuación (2.8.4). Al desarrollar en serie de potencias de  $\xi(Ddt)^{1/2}$ , el integrando de (3.1.2) da como resultado

$$\begin{aligned} P(x, t + dt) &= rdt \delta(x - x_r) \int_{-\infty}^{+\infty} dx' P(x', t) + (1 - rdt) \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi P_{\Xi}(\xi) \left[ P(x, t) - (Ddt)^{1/2} \xi \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} + Ddt \frac{\xi^2}{2} \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} + \dots \right]. \end{aligned} \quad (3.1.3)$$

Reteniendo solo los términos de primer orden en  $dt$  y realizando las integrales, en el límite

$dt \rightarrow 0$ , obtenemos

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} - rP(x, t) + r\delta(x - x_r) \int_{-\infty}^{+\infty} dx' P(x', t), \quad (3.1.4)$$

con condición inicial  $P(x, 0) = \delta(x - x_0)$ . El primer término del miembro derecho de la ecuación (3.1.4) es el término difusivo, que ya aparecía en la ecuación de Fokker-Planck (2.6.18). El segundo término representa la pérdida de probabilidad en  $x$  debido al reseteo a la posición  $x_r$ . Y el último término corresponde a la ganancia de probabilidad en  $x_r$  debido al reseteo desde todas las posibles posiciones de la partícula. Como es natural, si integramos (3.1.4) para todo  $x$ , obtenemos la conservación de la probabilidad, siempre y cuando tengamos condiciones de contorno naturales, es decir, corriente de probabilidad nula en los extremos.

De nuevo, podemos deducir una ecuación de Fokker-Planck “Backward” siguiendo un procedimiento similar al empleado en la sección 2.6, sólo que ahora le exigimos a la probabilidad  $P_{1|1}(x, t|x_0, t_0)$  que cumpla la ecuación (2.6.18). En consecuencia, se obtienen dos integrales adicionales, que al efectuarlas dan lugar a

$$- \frac{\partial P_{1|1}(x, t|x_0, t_0)}{\partial t_0} = D \frac{\partial^2 P_{1|1}(x, t|x_0, t_0)}{\partial x_0^2} - rP_{1|1}(x, t|x_0, t_0) + rP_{1|1}(x, t|x_r, t_0). \quad (3.1.5)$$

Adicionalmente, es posible aplicar la propiedad

$$- \frac{\partial P_{1|1}(x, t|x_0, t_0)}{\partial t_0} = \frac{\partial P_{1|1}(x, t|x_0, t_0)}{\partial t} \quad (3.1.6)$$

que proviene de la invarianza frente a traslaciones temporales de nuestro sistema, es decir, la función  $P_{1|1}(x, t|x_0, t_0)$  es función del tiempo a través de  $t - t_0$ . Por lo tanto, la ecuación “Backward” para la partícula difusiva bajo reseteo estocástico se puede reescribir de la forma

$$\frac{\partial P_{1|1}(x, t|x_0)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P_{1|1}(x, t|x_0)}{\partial x_0^2} - rP_{1|1}(x, t|x_0) + rP_{1|1}(x, t|x_r), \quad (3.1.7)$$

donde hemos suprimido la dependencia con el tiempo inicial  $t_0$ , ya que es constante y conocido. Cabe destacar que esta ecuación diferencial tiene un término local. Se trata del término de ganancia debido al reseteo, último término del miembro derecho de la ecuación (3.1.7), que indica que existe una contribución para todo  $x$  proveniente de  $X_r$ .

La ecuación (3.1.7) es comúnmente empleada para introducir el problema del tiempo de primer paso. El tiempo de primer paso  $T(x_0)$  se define como aquel empleado por un proceso estocástico para abandonar un determinado intervalo  $[a, b]$ , partiendo de una

posición inicial  $x_0 \in [a, b]$ . Nótese que el tiempo de primer paso es una variable estocástica. La forma en la que esta magnitud se conecta con la ecuación (3.1.7) es por medio de la denominada probabilidad de supervivencia

$$Q(x_0, t) = \int_a^b dx P_{1|1}(x, t|x_0). \quad (3.1.8)$$

Su significado es sencillo: si la partícula parte de la posición  $x_0$  en  $t_0 = 0$ ,  $Q(x_0, t)$  es la probabilidad de que, para el instante  $t$ , haya permanecido en el intervalo  $[a, b]$ . Al definirse como una integral de  $P_{1|1}(x, t|x_0, t_0)$ ,  $Q(x_0, t)$  también obedece la ecuación “Backward” (3.1.7),

$$\frac{\partial Q(x_0, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 Q(x_0, t)}{\partial x_0^2} - rQ(x_0, t) + rQ(x_r, t), \quad (3.1.9)$$

con condición inicial  $Q(x_0, 0) = 1$  y condiciones de contorno adecuadas. En particular, las condiciones de contorno absorbentes son relevantes en este contexto. Si existe un punto absorbente en  $x = a$ , tendremos que  $Q(a, t) = 0$  para  $t > 0$ .

Teniendo toda esta información en consideración, la probabilidad de que el tiempo de primer paso esté comprendido entre  $t$  y  $t + dt$  es igual al decrecimiento de la probabilidad de supervivencia entre esos dos mismos instantes, que matemáticamente se expresa como

$$P_T(x_0, t) dt = Q(x_0, t) - Q(x_0, t + dt) = -\frac{\partial Q(x_0, t)}{\partial t} dt, \quad (3.1.10)$$

siendo  $P_T(x_0, t)$  la densidad de probabilidad de la VE tiempo de primer paso.

## 3.2. Evolución temporal de la densidad de probabilidad

El procedimiento más evidente para encontrar la evolución temporal de nuestro sistema es tratar de resolver la ecuación (3.1.4). Sin embargo, los sistemas con reseteo típicamente admiten una forma más sencilla e intuitiva de llegar a una solución, tal y como veremos a continuación. Se trata de obtener la evolución del sistema bajo reseteo a partir de la evolución “natural” en ausencia de reseteo.

El primer paso es deducir la probabilidad en ausencia de reseteo ( $r = 0$ ), esto es, el propagador de la partícula difusiva, que denotaremos por  $P_0(x, t|x_0)$ .<sup>2</sup> Esta función

---

<sup>2</sup>El subíndice 0 indica la ausencia de reseteo dentro de la notación simplificada de la  $P$ , y no hay que confundirlo con el subíndice empleado al inicio del trabajo, donde este indicaba el número de variables de las que dependía la densidad de probabilidad.

satisface la ecuación (2.6.18) con condición inicial  $P_0(x, 0|x_0) = \delta(x - x_0)$  y condiciones de contorno naturales. Su solución es la gaussiana

$$P_0(x, t|x_0) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{1/2}} \exp \left[ -\frac{(x - x_0)^2}{4Dt} \right]. \quad (3.2.1)$$

La solución para el caso difusivo en presencia del reseteo poissoniano, solución de la ecuación (3.1.4), es expresable en términos de la expresión (3.2.1), teniendo en cuenta que se pueden plantear dos situaciones:

1. Cuando se alcanza el instante  $t$ , la partícula no ha sufrido ningún reseteo.
2. La partícula alcanza el instante  $t$  habiendo sufrido el último reseteo en el instante  $\tau_l = t - \tau$ .<sup>3</sup>

Para el reseteo poissoniano, con tasa  $r$ , la probabilidad de que no se hayan producido eventos de reseteo para el instante  $t$  es  $e^{-rt}$ , siendo la distribución exponencial  $re^{-r\tau}$  la densidad de probabilidad de que el último reseteo se haya dado hace un tiempo  $\tau$ . Teniendo en cuenta esto, la solución general de (3.1.4) se puede escribir como

$$P(x, t|x_0) = e^{-rt} P_0(x, t|x_0) + r \int_0^t d\tau e^{-r\tau} P_0(x, \tau|x_\tau), \quad (3.2.2)$$

donde en la integral del miembro derecho se están teniendo en cuenta todos los instantes  $\tau_l$  en los que se puede producir el último reseteo, yendo desde  $\tau_l = t$  hasta  $\tau_l = 0$ . Las trayectorias que tienen el último reseteo en ese instante, contribuyen a la densidad total con un término de difusión pura que parte de la posición de reseteo  $x_\tau$  como condición inicial. La ecuación (3.2.2) será mencionada de aquí en adelante como ecuación de renovación.

Obtenida la ecuación de renovación, que describe la evolución temporal del sistema, nos centramos en analizarla en detalle y estudiar sus implicaciones. Comenzamos por destacar que el sistema evoluciona hacia un estado estacionario, es decir,

$$P_{st}(x) \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} P(x, t) = r \int_0^{+\infty} d\tau e^{-r\tau} P_0(x, \tau|x_\tau). \quad (3.2.3)$$

Nótese que la única contribución al estado estacionario proviene del segundo término de la ecuación (3.2.2), lo que significa que en el estado estacionario todas las posibles trayectorias de la partícula han sufrido al menos un reseteo. Esto provoca que la dependencia de  $P_{st}$  con la posición inicial  $x_0$  se pierda. Por otro lado, la densidad de probabilidad en el estado estacionario es proporcional a la transformada de Laplace (donde  $r$  juega el papel

---

<sup>3</sup>Sólo es necesario tener en cuenta en qué instante se produce el último reseteo, ignorando cualquier otro previo.

del conjugado del tiempo) del propagador en ausencia de reseteo. Esta propiedad es una consecuencia directa del carácter poissoniano del reseteo.

Para evaluar la integral en (3.2.3), haremos uso de la identidad (ecuación (3.417.9) de la referencia [9])

$$\int_0^{+\infty} d\tau \tau^{\alpha-1} e^{-\frac{\beta}{\tau}-\gamma\tau} = 2 \left( \frac{\beta}{\gamma} \right)^{\alpha/2} K_{\alpha} \left( 2\sqrt{\beta\gamma} \right), \quad (3.2.4)$$

donde  $K_{\alpha}$  es la función de Bessel modificada de segunda especie de orden  $\alpha$ . Comparando las ecuaciones (3.2.4) y (3.2.3), observamos que para nuestro caso particular

$$\beta = \frac{(x - x_r)^2}{4D}; \quad \gamma = r; \quad \alpha = 1/2. \quad (3.2.5)$$

Para el valor del último parámetro  $\alpha$ , la función de Bessel modificada de segunda especie adopta la forma [8]

$$K_{1/2}(y) = \left( \frac{\pi}{2y} \right)^{1/2} e^{-y}. \quad (3.2.6)$$

Empleando (3.2.5) y (3.2.6), resolvemos la integral de (3.2.3) y finalmente obtenemos

$$P_{st}(x) = \frac{\alpha_0}{2} e^{-\alpha_0|x-x_r|}, \quad (3.2.7)$$

donde  $\alpha_0 = \left( \frac{r}{D} \right)^{1/2}$  es una constante con unidades de inversa de longitud. Esta magnitud define una escala espacial característica del sistema, del mismo modo que  $r$  define una escala temporal. La existencia de escalas características en nuestro problema nos permite adimensionalizar la ecuación (3.1.4), y ver de forma más clara cómo influyen estos parámetros en la dinámica del problema. Definimos entonces la densidad de probabilidad adimensionalizada  $\tilde{P}(\tilde{x}, \tilde{t}) = \alpha_0^{-1} P(x, t)$ , con  $\tilde{x} = \alpha_0(x - x_r)$  y  $\tilde{t} = rt$ , que verifica

$$\frac{\partial \tilde{P}(\tilde{x}, \tilde{t})}{\partial \tilde{t}} = \frac{\partial^2 \tilde{P}(\tilde{x}, \tilde{t})}{\partial \tilde{x}^2} - \tilde{P}(\tilde{x}, \tilde{t}) + \delta(\tilde{x}). \quad (3.2.8)$$

Comparando (3.2.8) con (3.1.4) nos percatamos de que, usando las escalas de espacio y tiempo características introducidas, el comportamiento del sistema es universal, independiente de los parámetros  $r$ ,  $D$ . La adimensionalización simplifica a nivel extremo el problema en este caso. La versión adimensional del estado estacionario expresado en la ecuación (3.2.3) pasa a ser

$$\tilde{P}_{st}(\tilde{x}) = \frac{1}{2} e^{-|\tilde{x}|}. \quad (3.2.9)$$

A partir de este momento, y hasta que se diga lo contrario, trabajaremos con magnitudes adimensionales, eliminando las tildes por comodidad. La distribución de probabilidad en el

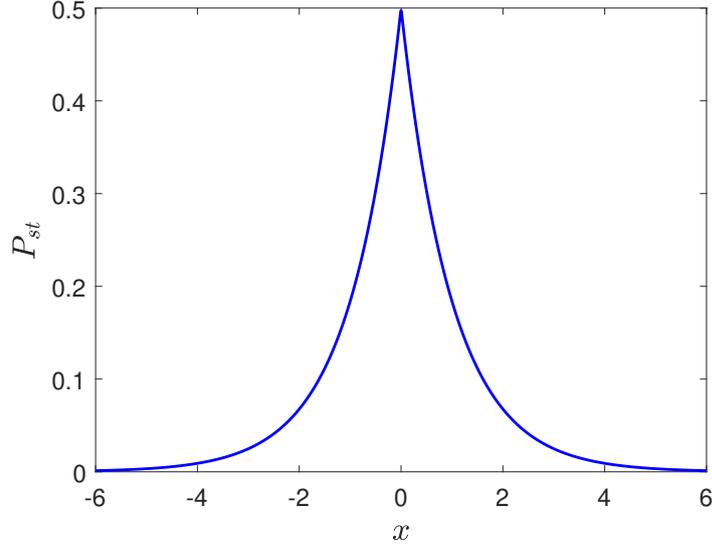


Figura 3.1. Distribución de equilibrio de la partícula browniana con reseteo poissoniano.

estado estacionario (3.2.9), representada en la figura 3.1, se caracteriza por un decaimiento exponencial a ambos lados de la posición de reseteo  $x_r$ , lo que origina una discontinuidad de la primera derivada en ese mismo punto. Esta característica es síntoma de que el estado alcanzado es estacionario, pero no de equilibrio, lo que se manifiesta en que la corriente de probabilidad estacionaria debido al reseteo es no nula. Si bien por una parte existen flujos de probabilidad difusivos que tienden a neutralizarse punto por punto, constantemente y de forma aleatoria, se genera otro flujo debido al reseteo hacia la posición  $x_r$  desde cualquier otra posición  $x \neq x_r$ , que impide que se lleguen a compensar las corrientes de probabilidad debidas a la difusión.

Una vez deducida y analizada la solución en el estado estacionario de no equilibrio (NESS, del inglés “Non Equilibrium Steady State”), vamos a entender cómo el sistema relaja a ese estado, completando así el análisis de la densidad de probabilidad para todos los tiempos. Con este propósito, considerando que la posición inicial y de reseteo coinciden, comenzamos por reescribir la ecuación de renovación (3.2.2) ya adimensionalizada como

$$P(x, t) = \frac{e^{-t\Phi(1,x/t)}}{\sqrt{4\pi t}} + \frac{t^{1/2}}{\sqrt{4\pi}} \int_0^1 \frac{dw}{w^{1/2}} e^{-t\Phi(w,x/t)}, \quad (3.2.10)$$

donde se ha realizado el cambio de variable  $\tau = wt$ , y se ha definido

$$\Phi(w, y) = w + \frac{y^2}{4w}. \quad (3.2.11)$$

La integral de la ecuación (3.2.10) puede resolverse de forma aproximada mediante el método de Laplace [10]. Este método aprovecha el hecho de que, si  $\Phi$  tiene un mínimo  $w^*$ ,

la función  $e^{-t\Phi(w,y)}$  varía exponencialmente en torno a ese punto, es decir, es una función picuda en torno a  $w^*$ , por lo que el término dominante en la integral será  $e^{-t\Phi(w^*,y)}$ . Dicha aproximación mejorará a medida que  $t$  sea más grande. Entonces en nuestra situación, para tiempos largos, manteniendo  $y = x/t$  fijo, el mínimo de  $w^*$ , si existe, se produce en

$$w^* = \frac{|y|}{2}. \quad (3.2.12)$$

Llegados a este punto, se abren dos posibilidades: o bien  $w^*$  está contenido en el intervalo  $[0, 1]$ , o bien  $w^* > 1$ . En la primera situación, al producirse el mínimo dentro del intervalo de integración, la expresión (3.2.10) toma la forma  $P(x, t) \sim e^{-t\Phi(w^*, x/t)}$ , donde  $\Phi(w^*, y) = |y|$ . Por otro lado, cuando  $w^* > 1$ , la función  $\Phi(w, y)$  es monótonamente decreciente en el intervalo de integración, alcanzando el valor mínimo en el borde  $w = 1$ . Esto implica que en dicho caso, los dos términos de la ecuación (3.2.10) son del mismo orden, dando lugar a  $P(x, t) \sim e^{-t\Phi(1, x/t)}$ , con  $\Phi(1, y) = 1 + y^2/4$ . Estos resultados se pueden resumir en la función

$$P(x, t) \sim e^{-tI(x/t)}, \quad (3.2.13)$$

donde la función  $I(y)$  es de la forma

$$I(y) = \begin{cases} |y| & \text{si } |y| < y^* \\ 1 + \frac{y^2}{4} & \text{si } |y| > y^*, \end{cases} ; \quad \text{con } y^* = 2. \quad (3.2.14)$$

En vista de estos resultados, para  $t$  grande pero finito, existe una región  $-y^*t < x < y^*t$  donde la densidad de probabilidad es independiente de  $t$ , es decir, en ella se ha alcanzado el NESS (en concordancia con la ecuación (3.2.9)), mientras que en la región exterior  $|x| > y^*t$  el sistema aún se encuentra en un régimen transitorio. Las fronteras entre estos dos comportamientos, localizadas en los puntos  $x^* = \pm y^*t$ , avanzan a una velocidad  $y^*$ , y en ellas la ecuación (3.2.14) presenta una discontinuidad, no en su primera derivada, sino en la segunda (ecuación (A28) de la referencia [11])

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} [I''(x^* - \varepsilon) - I''(x^* + \varepsilon)] = -\frac{1}{2}, \quad (3.2.15)$$

por lo que se está produciendo una transición de fase de segundo orden dinámica.

Esta particular situación admite una interpretación desde un punto de vista físico, si revisamos el significado de los dos términos de la ecuación de renovación (3.2.10). Para la región exterior  $|x| > y^*t$ , la densidad de probabilidad es del orden del primer término de

(3.2.10), que recordando del principio del presente apartado, atribuíamos a aquellas trayectorias que no habían sufrido resets para el instante  $t$ . Este estado es sumamente raro, así que las partículas que se hallen en esta zona habrán descrito trayectorias inusuales. Por lo contrario, las partículas que se encuentren en la zona donde se ha alcanzado el NESS describirán trayectorias típicas, que habrán pasado por múltiples eventos de reseteo. La separación entre ambos tipos de trayectorias la aporta la función  $I(y)$ .

### 3.3. Tiempo de primer paso

Consideramos ahora el problema de tiempo de primer paso para la partícula difusiva en el intervalo  $[0, +\infty)$ , con punto absorbente en el origen y condición de contorno natural en infinito

$$Q(0, t) = \lim_{x_0 \rightarrow +\infty} \partial_{x_0} Q(x_0, t) = 0. \quad (3.3.1)$$

Nótese que, al estar en infinito, la condición asumida es que existe un valor asintótico para la probabilidad de supervivencia.

Al final de la sección 3.1, ya habíamos visto que la densidad de probabilidad del tiempo de primer paso estaba directamente relacionada con la probabilidad de supervivencia por medio de la expresión (3.1.10). Sabiendo que la probabilidad de supervivencia cumple la ecuación (3.1.9), podemos inferir la densidad de probabilidad del tiempo de primer paso y resolver el problema. Sin embargo, una forma más intuitiva de abordar el estudio del tiempo de primer paso (además de más sencilla) es mediante su valor medio

$$\langle T(x_0) \rangle = \int_0^{+\infty} dt t \left( -\frac{\partial Q(x_0, t)}{\partial t} \right), \quad (3.3.2)$$

que integrando por partes, y asumiendo que  $tQ(x_0, t) \rightarrow 0$  cuando  $t \rightarrow +\infty$ , se reduce a

$$\langle T(x_0) \rangle = \int_0^{+\infty} dt Q(x_0, t). \quad (3.3.3)$$

Cabe destacar, que utilizaremos escalas características de espacio y tiempo diferentes a las utilizadas en la sección anterior, por lo que hemos vuelto a las ecuaciones con dimensiones tal y como en el inicio de este trabajo. Integrando (3.1.9) respecto del tiempo, obtenemos una ecuación diferencial para el tiempo medio de primer paso (MFPT, del inglés “Mean First Passage Time”)

$$-1 = D \frac{d^2 \langle T(x_0) \rangle}{dx_0^2} - r \langle T(x_0) \rangle + r \langle T(x_r) \rangle. \quad (3.3.4)$$

Las condiciones de contorno se obtienen partir de las planteadas para la probabilidad de supervivencia considerando la ecuación (3.3.3), es decir,

$$\langle T(x_0 = 0) \rangle = 0; \quad \lim_{x_0 \rightarrow +\infty} \langle T(x_0) \rangle < +\infty. \quad (3.3.5)$$

Al igual que en la sección 3.2, es conveniente adimensionalizar las variables de nuestro problema. Como en esta situación estamos interesados en ver la dependencia del MFPT con la tasa de reseteo  $r$ , vamos a introducir la adimensionalización de otra forma. Definimos  $\tilde{x} = x_0/x_r$  y  $\tilde{r} = \gamma r$ , donde  $\gamma = x_r^2/D$ , que es un parámetro con unidades de tiempo. El MFPT adimensional entonces es  $\langle \tilde{T}(\tilde{x}) \rangle = \langle T(x_0) \rangle / \gamma$ . Por simplicidad obviaremos las tildes en adelante, eso sí, teniendo en cuenta que trabajamos con variables adimensionales.

Tras estas manipulaciones, el problema se replantea como

$$-1 = \frac{d^2 \langle T(x) \rangle}{dx^2} - r \langle T(x) \rangle + r \langle T(1) \rangle, \quad (3.3.6)$$

con condiciones de contorno

$$\langle T(x = 0) \rangle = 0; \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} \langle T(x) \rangle < +\infty. \quad (3.3.7)$$

Resolviendo (3.3.6) por el método de los coeficientes indeterminados, obtenemos la solución general del MFPT

$$\langle T(x) \rangle = Ae^{\sqrt{r}x} + Be^{-\sqrt{r}x} + \frac{1 + r \langle T(1) \rangle}{r}. \quad (3.3.8)$$

Aplicando la condición de regularidad  $\lim_{x \rightarrow +\infty} \langle T(x) \rangle < +\infty$ , deducimos que  $A = 0$ , y empleando  $\langle T(x = 0) \rangle = 0$  fijamos la constante  $B$  al valor

$$B = -\frac{1 + r \langle T(1) \rangle}{r}. \quad (3.3.9)$$

Finalmente, se obtiene

$$\langle T(x) \rangle = \frac{1 + r \langle T(1) \rangle}{r} \left( 1 - e^{-\sqrt{r}x} \right). \quad (3.3.10)$$

Para acabar de resolver el MFPT sólo falta calcular  $\langle T(1) \rangle$ , lo que se hace forzando la autoconsistencia de la ecuación (3.3.10). En particular, puesto que consideramos que la posición de partida de la partícula coincide con la posición de reseteo, es precisamente  $\langle T(1) \rangle$  el MFPT que buscamos,

$$\langle T \rangle = \langle T(1) \rangle = \frac{1}{r} \left( e^{\sqrt{r}} - 1 \right). \quad (3.3.11)$$

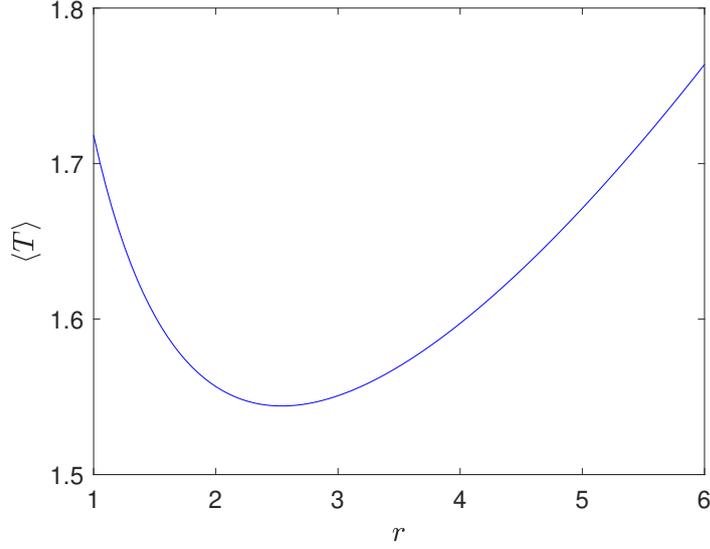


Figura 3.2. Tiempo medio de primer paso frente a la tasa de reseteo  $r$  para  $x = 1$ . Claramente  $\langle T \rangle$  diverge en los límites de  $r \rightarrow 0$  y  $r \rightarrow +\infty$ , alcanzando un mínimo en  $r^* \simeq 2,54$ .

En vista de la ecuación (3.3.3), el MFPT diverge en el límite de  $r \rightarrow 0$  como  $\langle T \rangle \sim r^{-1/2}$ . Esta tendencia es esperada, ya que al anular la tasa de reseteo recuperamos la situación de difusión pura. En dicho contexto, la partícula realiza largas excursiones alejada del origen, comportamiento provocado por la extensión de las colas de la distribución gaussiana, cuya anchura aumenta con el tiempo. De igual manera,  $\langle T \rangle$  diverge para  $r \rightarrow +\infty$ , ya que disminuimos el tiempo que tiene la partícula disponible entre reseteos para difundirse hacia el punto absorbente.

Si  $\langle T \rangle$  crece monótonamente, al acercarse a los límites  $r \rightarrow 0$  y  $r \rightarrow +\infty$ , debe existir un valor  $r^*$  que minimice el MFPT (véase la figura 3.2), es decir,

$$\left. \frac{d\langle T \rangle}{dr} \right|_{r=r^*} = 0. \quad (3.3.12)$$

Esta condición se reduce a la ecuación trascendental

$$\frac{\sqrt{r^*}}{2} = 1 - e^{-\sqrt{r^*}}, \quad (3.3.13)$$

cuya única solución no nula es  $r^* = [W_0(-2e^{-2}) + 2]^2 \approx 2,54$ . La función  $W_0$  es la rama principal de la función  $W$  de Lambert, que se define de la forma siguiente: sea  $y = ze^z$ , la función  $W$  de Lambert es la función inversa de  $y$ , es decir,  $z = W(y)$ . La función  $W$  de Lambert, de dominio  $y \in [-1/e, +\infty)$ , no es siempre monovaluada, por lo que se define separándola en dos ramas. La rama principal  $W_0$ , con  $y \in [-1/e, +\infty)$ , y  $W \geq -1$ ; y la rama alternativa  $W_{-1}$ , definida en el intervalo  $y \in [-1/e, 0)$  con  $W \leq -1$ .

# Capítulo 4

## Simulación numérica

En este capítulo, empleamos el método de Monte Carlo para simular un número estadísticamente significativo de trayectorias difusivas con reseteo poissoniano. Mediremos magnitudes derivadas de interés, que serán comparadas con las predicciones teóricas correspondientes, deducidas a lo largo del capítulo anterior. Los códigos de MATLAB correspondientes a las simulaciones de este trabajo pueden encontrarse en los anexos I y II al final de este trabajo.

### 4.1. El método de Monte Carlo

Como ya hemos podido ver en secciones anteriores, las ecuaciones implicadas en la caracterización de procesos estocásticos pueden ser tremendamente complejas desde un punto de vista matemático, dependiendo del fenómeno físico bajo estudio. Esto conlleva que en la gran mayoría de situaciones no sea posible hallar una solución analítica exacta, por lo que es habitual el uso de métodos numéricos para obtener información sobre la solución de dichos problemas. Los métodos numéricos constituyen también un test muy conveniente si se ha realizado alguna predicción teórica aproximada basada en alguna simplificación matemática, validando (o refutando) así la teoría mediante comparación directa con la simulación.

En procesos de Markov, un método ampliamente utilizado es el denominado método de Monte Carlo. Este consiste en generar numéricamente una gran cantidad de realizaciones  $\{x_i(t)\}$  del proceso estudiado, siendo  $i$  el índice que etiqueta la trayectoria. Cada trayectoria está constituida por una serie temporal  $x_i(t_0), x_i(t_1), \dots$  en los instantes  $t_0, t_1, \dots$ ,

generada mediante un algoritmo, basado en la generación de números pseudoaleatorios, adecuado. Para procesos de Markov continuos, este algoritmo parte habitualmente de una versión discretizada de la ecuación de Langevin (2.8.2), que en el caso de difusión con reseteo poissoniano toma la forma de la ecuación (3.1.1). Para la implementación numérica, simplemente se sustituye el diferencial de tiempo  $dt$  por un intervalo  $\Delta t$ , que debe ser suficientemente pequeño como para garantizar el buen funcionamiento del algoritmo. Por tanto, una posible implementación del algoritmo es:

1. Establecer los valores de partida de las variables de posición y tiempo, es decir, la condición inicial  $x(t_0) = x_0$ .
2. Escoger el paso de tiempo  $\Delta t$  para la integración de las ecuaciones.
3. Generar un número aleatorio. Dicho número se compara con  $r\Delta t$ . De acuerdo con la ecuación (3.1.1), si  $\eta > r\Delta t$ , se realiza un paso de difusión. Si no, la partícula se resetea.
4. Si hay reseteo, actualizamos el proceso al valor  $x = x_r$ . En caso contrario, generamos un número aleatorio  $\xi$  distribuido de acuerdo a una gaussiana de media nula y varianza unitaria  $N(0, 1)$ , y actualizamos el proceso a  $x = x + \xi(\Delta t)^{1/2}$ . Indistintamente del resultado, avanzamos un paso de tiempo,  $t \rightarrow t + \Delta t$ .
5. Guardamos los nuevos valores del proceso y volvemos al paso 3 hasta finalizar la simulación.

Ahora bien, ¿cómo generamos números aleatorios para ejecutar los pasos 3 y 4? Comenzando por el tercer paso, la variable que decide si hay difusión o reseteo en cada instante puede obtenerse a partir de una distribución uniforme. Si tenemos una VE  $H$ , cuyos valores se distribuyen de acuerdo a una distribución uniforme  $P_H(\eta) = 1$  en el intervalo  $\eta \in [0, 1]$ , la probabilidad de que se encuentren en el intervalo  $[0, r\Delta t]$  viene dada por

$$\int_0^{r\Delta t} d\eta P_H(\eta) = r\Delta t. \quad (4.1.1)$$

Por otro lado, la probabilidad de obtener un valor  $\eta$  dentro del intervalo complementario  $[r\Delta t, 1]$  es  $1 - r\Delta t$ . Por lo tanto, si generamos un número aleatorio uniformemente distribuido y su valor es inferior a  $r\Delta t$ , actualizamos la posición del proceso en  $x = x_r$ , y si resulta un valor mayor a  $r\Delta t$ , realizaremos difusión de acuerdo a la regla  $x = x + \xi(\Delta t)^{1/2}$ . Este procedimiento, aunque funcional, presenta un problema, y es la enorme carga de cálculo numérico que supone. Para  $r$  no muy altos, generamos una gran cantidad de números aleatorios que acaban dando lugar a la misma respuesta: el rechazo del reseteo. Una al-

ternativa que reduce el número de extracciones de números aleatorios, y que será por la que nos decantemos en este trabajo, es generar a priori el instante de tiempo donde se producirá el reseteo, y realizar la difusión hasta alcanzar dicho instante. Si bien el número de eventos de reseteo en un intervalo de tiempo sigue una distribución de Poisson, el tiempo entre reseteos sigue una distribución exponencial de parámetro  $r$ ,

$$P(t) = re^{-rt}, \quad t \geq 0. \quad (4.1.2)$$

Para generar números aleatorios con esta distribución de probabilidad, recurrimos al método de la transformada inversa. Este consiste en generar números aleatorios  $y$  que siguen una distribución objetivo arbitraria  $P_Y(y)$  por medio de la generación de números aleatorios  $\eta$  uniformemente distribuidos en el intervalo  $(0,1)$ . Consideramos la transformación de variables<sup>1</sup>

$$y = F^{-1}(\eta). \quad (4.1.3)$$

Teniendo en cuenta que nuestro objetivo es generar tiempos distribuidos por una exponencial, tenemos que la función de transformación de variables debe verificar

$$F(t) = \int_0^t dt' re^{-rt'} = 1 - e^{-rt} = 1 - \eta, \quad (4.1.4)$$

donde se ha tenido en cuenta que, si  $\eta$  es un número uniformemente distribuido entre 0 y 1, también lo será la variable  $1 - \eta$ . Despejando  $t$  en términos de  $\eta$  llegamos a

$$t = \frac{1}{r} \ln \left( \frac{1}{\eta} \right). \quad (4.1.5)$$

De esta forma, generando números aleatorios uniformemente distribuidos entre 0 y 1, somos capaces de generar una serie de números aleatorios con la distribución exponencial, que constituirán los intervalos de tiempo que separan los instantes en donde se produce el reseteo en nuestra simulación.

Por otro lado, es habitual el uso de algoritmos predeterminados para la generación de números distribuidos con una distribución normal, este será nuestro caso. Sin embargo, también existen formas alternativas de generarlos a partir de números uniformemente distribuidos, como el método de Box-Müller [6].

Una vez generadas las trayectorias estocásticas, podemos estimar cualquier variable dinámica del sistema numéricamente. En particular, nos interesará determinar valores

---

<sup>1</sup>Una descripción detallada e intuitiva de la lógica detrás de este método puede encontrarse en la referencia [6].

esperados

$$\langle X(t) \rangle_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i(t), \quad (4.1.6)$$

donde el subíndice  $N$  indica el número de realizaciones sobre el que estamos realizando los promedios. Debido precisamente a que  $N$  es un número finito, realmente  $\langle X(t) \rangle_N$  es una variable aleatoria, y por tanto está sujeta a una incertidumbre. Si  $N$  es lo suficientemente grande, el teorema del límite central nos garantiza que  $\langle X(t) \rangle_N$  se comporta como una VE distribuida de acuerdo a una gaussiana de valor esperado  $\mu = \langle X(t) \rangle$  y desviación estándar  $\sigma = \sigma_X / \sqrt{N}$ , con  $\sigma_X = \sqrt{\langle X^2(t) \rangle - \langle X(t) \rangle^2}$ . Por ello, se puede estimar la incertidumbre asociada a la medida del valor medio como

$$\langle X(t) \rangle \approx \langle X(t) \rangle_N \pm \lambda N^{-1/2} (\langle X^2(t) \rangle_N - \langle X(t) \rangle_N^2)^{1/2}. \quad (4.1.7)$$

El parámetro  $\lambda$  es un número que marca el tamaño de nuestro intervalo de confianza, es decir, con cuánta probabilidad queremos afinar el resultado exacto de  $\langle X(t) \rangle$ . Nosotros usaremos la elección habitual,  $\lambda = 3$ , que hace que la probabilidad de obtener un valor dentro del intervalo de confianza sea del 99,7%.

También podemos usar los datos de simulación para obtener numéricamente la distribución de probabilidad  $P(x, t)$ . En principio, podemos estimar la probabilidad como una relación entre casos favorables y número total de casos, es decir  $p = N_{fav} / N_{total}$ . Cuando nuestra VE de estudio es continua, la forma de proceder es construir un histograma de barras discretizando la variable en cajones de anchura  $\Delta x$ , de forma que la altura sobre cada uno de estos cajones será igual al número de valores resultado del muestreo por simulación que caigan en el intervalo, que denotamos por  $N(x, x + \Delta x)$ , dividido por  $N\Delta x$ , de forma que

$$P(x, t) dx \approx \frac{N(x, x + \Delta x)}{N\Delta x} \Delta x, \quad (4.1.8)$$

volviéndose una igualdad en el doble límite  $\Delta x \rightarrow 0$ ,  $N \rightarrow +\infty$ .

## 4.2. Simulaciones para la obtención de la densidad de probabilidad

En esta sección estudiamos la evolución de la densidad de probabilidad de la partícula difusiva bajo reseteo poissoniano  $P(x, t)$ , empleando el método de Monte Carlo, para compararla con los resultados analíticos obtenidos en la sección 3.2. Generamos las trayectorias

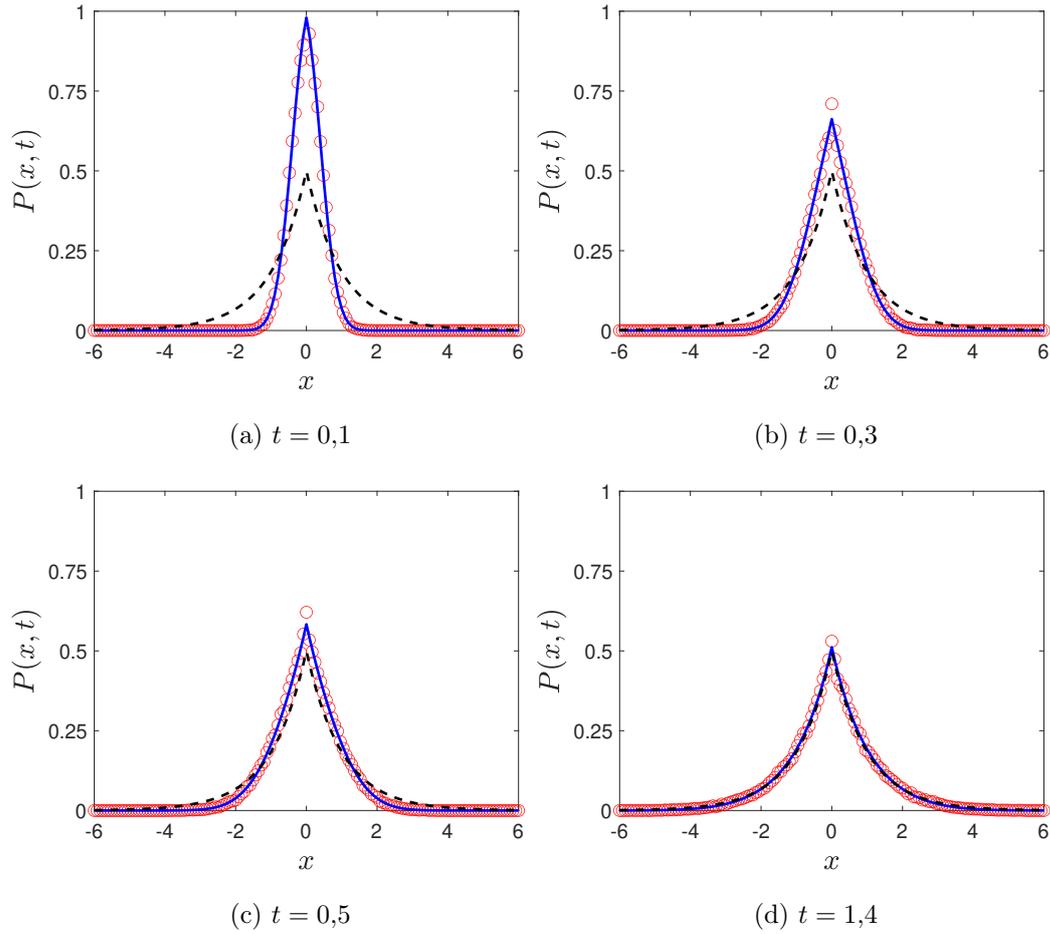


Figura 4.1. Evolución de la distribución  $P(x, t)$  frente a la posición de la partícula  $x$  para distintos instantes de tiempo. Los círculos rojos representan los valores de la probabilidad obtenidos mediante  $N = 10^5$  simulaciones de Monte Carlo con  $\Delta t = 5 \times 10^{-3}$ . Por su parte, la línea continua azul corresponde al resultado exacto de la ecuación de renovación (3.2.10) evaluada numéricamente en el software Mathematica, y la línea discontinua en negro representa la expresión analítica de la distribución estacionaria (3.2.9).

de la partícula de acuerdo al procedimiento explicado en la sección anterior, tomando la precaución de adimensionalizar la ecuación de Langevin discretizada de acuerdo a lo visto en la sección 3.2, tras lo que resulta

$$\begin{aligned}
 x(t + \Delta t) &= 0, \quad \text{con probabilidad } \Delta t, \\
 &\approx x(t) + \xi(\Delta t)^{1/2}, \quad \text{con probabilidad } (1 - \Delta t).
 \end{aligned}
 \tag{4.2.1}$$

Para garantizar que visualizamos todo el proceso de relajación al estado estacionario de la distribución de probabilidad  $P(x, t)$ , debemos establecer un criterio que, aunque no sea matemáticamente riguroso, sea capaz de darnos una idea de hasta qué tiempo hay

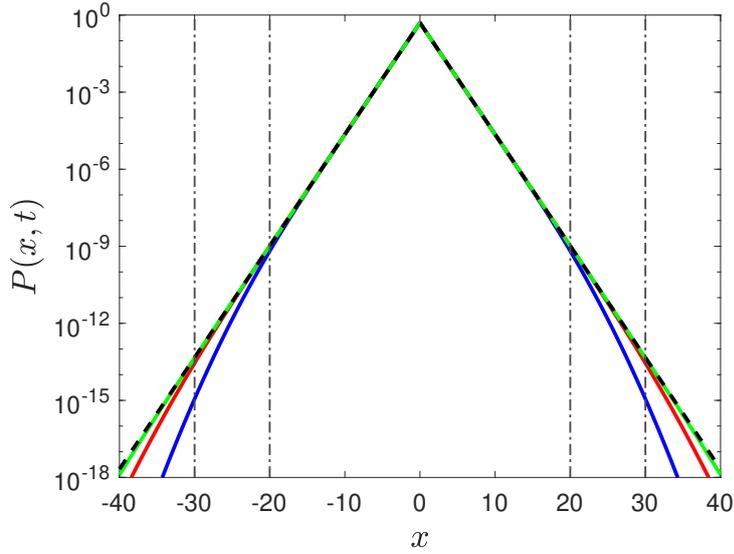


Figura 4.2. Evolución de la distribución de probabilidad  $P(x, t)$ , en escala logarítmica, frente a la posición de la partícula  $x$  para los instantes  $t = 10$  (línea continua azul),  $t = 15$  (línea continua roja) y  $t = 20$  (línea continua verde), resultado de evaluar la ecuación de renovación (3.2.10) en el software Mathematica. La línea discontinua en negro representa la expresión analítica de la distribución estacionaria (3.2.9), y las líneas verticales discontinuas representan las fronteras entre los regímenes estacionario y transitorio situadas en  $x^* = \pm 2t$ , para  $t = 10$  y  $t = 15$ . No se representan datos de simulación por el elevado coste computacional para alcanzar densidades de probabilidad tan bajas.

que simular las trayectorias estocásticas para alcanzar el NESS. Al final de la sección 3.2, dedujimos que la densidad de probabilidad exhibía dos comportamientos, con una clara frontera que los dividía. Por un lado, en la región interior  $|x| < 2t$  se había alcanzado el NESS, y en el resto del espacio, persistía un régimen transitorio en el que la distribución de probabilidad todavía era dependiente del tiempo. Entonces, para que se pueda considerar que hemos alcanzado el estado estacionario en todo el espacio, será preciso que el sistema evolucione hasta que la frontera entre los dos regímenes haya cubierto el rango de posiciones que se represente. Si representamos un intervalo simétrico de posiciones  $[-x_M, x_M]$ , deberemos simular al menos hasta

$$t_{st} \sim \frac{x_M}{2}, \quad (4.2.2)$$

donde cabe recordar que estamos trabajando con magnitudes adimensionales. Si escogemos  $x_M = 40$ , entonces debemos simular trayectorias hasta  $t_{st} = 20$ .

Generamos entonces histogramas para comparar los datos de simulación con la dis-

tribución analítica, usando una anchura de cajón  $\Delta x = 5 \times 10^{-3}$ , un paso de tiempo  $\Delta t = 5 \times 10^{-3}$  y un número de trayectorias  $N = 10^5$ . De esta forma, se consigue una resolución adecuada para la densidad de probabilidad, sin aumentar excesivamente el coste computacional. Tomando algunos instantes de tiempo entre 0 y  $t_{st}$ , caracterizamos la evolución temporal, tal y como se puede ver en las figuras 4.1 y 4.2 en escala lineal y logarítmica respectivamente. Para los primeros instantes, se aprecian grandes cambios en la densidad de probabilidad, alcanzando una forma muy similar a la distribución estacionaria para el instante  $t = 1,4$  a escala lineal. Sin embargo, el NESS no se ha logrado en todo el espacio, sólo que al trabajar en una escala lineal, no es posible apreciar las diferencias entre ambas distribuciones para dicho instante. Empleando una escala logarítmica para instantes de tiempo posteriores, vemos que, efectivamente, existe una región interior donde el comportamiento es estacionario, y otra zona exterior donde  $P(x, t)$  aún se halla en un régimen transitorio, ambas separadas por las fronteras ubicadas en  $x^* = \pm 2t$ , en completo acuerdo con la predicción teórica obtenida en la sección 3.2.

### 4.3. Simulaciones para el tiempo de primer paso

En esta sección, comparamos el tiempo medio de primer paso obtenido de forma analítica con datos de simulación obtenidos a partir del método de Monte Carlo. Partimos nuevamente del procedimiento estudiado en la sección 4.1, sin embargo es necesario comentar algunos detalles adicionales: ahora nuestra variable de interés es el tiempo, y la evolución de la posición la emplearemos únicamente para compararla con la posición del punto absorbente que, de forma consistente con lo presentado en la sección 3.3, se sitúa en  $x_{abs} = 0$ . La primera vez que se alcanza en la simulación la posición absorbente, se registra el tiempo para el que se ha logrado y comenzamos una nueva trayectoria. Al igual que en la sección 4.2, se han simulado  $N = 10^5$  realizaciones del proceso de primer paso para obtener resultados estadísticamente significativos. Otro factor importante y especialmente sensible, lo constituye el paso de tiempo  $\Delta t$  de la simulación. En la figura 4.3, se compara la curva teórica de la MFPT en función de  $r$  para distintos conjuntos de valores, variando  $r$  y el paso de tiempo  $\Delta t$ . Para cada  $\Delta t$ , se observa que la forma cualitativa de la curva se reproduce. No obstante, no es hasta alcanzar  $\Delta t = 10^{-5}$  que los puntos obtenidos por la simulación se vuelven compatibles con la predicción teórica,

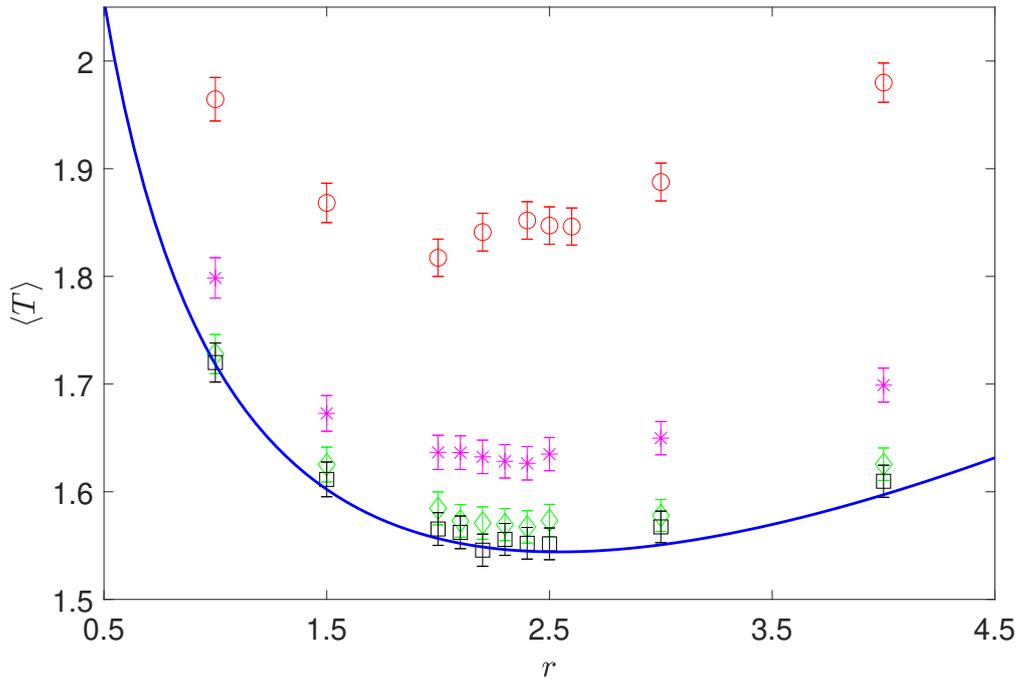


Figura 4.3. Tiempo medio de primer paso (MFPT) frente a la tasa de reseteo  $r$ , con condición inicial  $x = 1$ . En línea continua azul, se representa la expresión analítica (3.3.11). Las nubes de puntos con barras de error por su parte corresponden a los resultados de simulación obtenidos para  $\Delta t = 10^{-2}$  (círculos en rojo),  $\Delta t = 10^{-3}$  (asteriscos en magenta),  $\Delta t = 10^{-4}$  (diamantes en verde) y  $\Delta t = 10^{-5}$  (cuadrados en negro). En todos los casos, se han realizado los promedios con un número de trayectorias  $N = 10^5$ .

teniendo en cuenta la desviación típica. Es decir, hay que escoger un paso de simulación considerablemente pequeño para que este procedimiento sea efectivo a la hora de estimar el tiempo medio de primer paso. Por lo tanto, parece que el algoritmo empleado para realizar las simulaciones, cuyo error es del orden de  $\Delta t^{3/2}$ , no es la alternativa más óptima. Existen métodos más refinados que llegan a ordenes superiores [12] y, dado que  $\Delta t$  parece tan importante, convendría probar si estos algoritmos más refinados llevan a una mejor convergencia hacia el resultado teórico.

# Capítulo 5

## Resumen y conclusiones

Finalmente, presentamos de forma resumida en este último capítulo las conclusiones a las que hemos llegado tras la realización de este trabajo.

1. Hemos revisado los fundamentos de la teoría de procesos estocásticos, centrándonos en particular en los procesos de Markov.
2. Hemos definido el problema elemental de la partícula browniana, planteando si sus variables dinámicas, es decir, la posición y la velocidad, son o no procesos de Markov. Esta discusión nos ha servido para enfatizar la importancia de la escala temporal en el modelado del problema. En particular, escogiendo una escala de tiempo de registros de la posición de la partícula browniana suficientemente gruesa, se garantiza el carácter markoviano de la misma.
3. Para finalizar con la presentación del formalismo matemático necesario para la descripción de la evolución de la partícula browniana, hemos deducido la ecuación de Fokker-Planck tanto en su versión “Forward” (2.6.6) como en su versión “Backward” (2.7.3).
4. Hemos introducido el problema de la partícula browniana añadiendo el ingrediente de reseteo estocástico. En concreto, se ha asumido reseteo poissoniano, en el que la partícula tiene la posibilidad de reiniciar su dinámica cada cierto tiempo, relocalizándose en una posición  $x_r$  con tasa fija  $r$ . A su vez, hemos deducido el cambio que este ingrediente adicional supone en la ecuaciones de evolución de la densidad de probabilidad del sistema.
5. Al considerar condiciones de contorno naturales, esto es, flujo de probabilidad nulo en  $x \rightarrow \pm\infty$ , el sistema evoluciona asintóticamente hacia un estado estacionario

de no equilibrio exponencial. Hemos predicho la evolución exacta, recogida en la ecuación de renovación (3.2.10). Además, mediante el uso del método de Laplace, hemos logrado comprender que, para tiempos grandes, los alrededores del punto de reseteo están en buena aproximación en el estacionario, mientras que la evolución sucede más allá de una frontera que evoluciona a velocidad constante.

6. Hemos planteado el problema de primer paso mediante el formalismo de la ecuación “Backward”, y hemos resuelto la media del tiempo de primer paso (MFPT). Cabe destacar que, dado que tanto la ausencia de reseteo ( $r = 0$ ) como el reseteo continuo ( $r \rightarrow \infty$ ) conducen a un MFPT divergente, emerge una tasa de reseteo óptimo  $r^*$  que minimiza el MFPT. Nótese que, en última instancia, lo que juega el papel principal es el parámetro adimensional  $rX_r^2/D$
7. Finalmente, utilizando un algoritmo numérico basado en el método de Monte Carlo, hemos simulado un número estadísticamente significativo de trayectorias de la partícula browniana bajo la acción de reseteo poissoniano. De estas simulaciones, hemos podido inferir estimaciones de las variables dinámicas abordadas en la teoría. Al comparar ambas, hemos observado un acuerdo muy bueno tanto para la distribución de probabilidad, como para el tiempo medio de primer paso. Cabe destacar que, en este último, para alcanzar un buen acuerdo entre los datos de simulación y la expresión analítica (3.3.11), hemos necesitado disminuir considerablemente el paso de tiempo de la simulación  $\Delta t$ , lo que plantea la perspectiva de utilizar algoritmos más refinados (de mayor orden en  $\Delta t$ ) para integrar la ecuación de Langevin (4.2.1).

# Bibliografía

- [1] G. M. Viswanathan, S. V. Buldyrev, S. Havlin, M. G. E. da Luz, E. P. Raposo y H. E. Stanley, *Nature* **401**, 911 (1999).
- [2] N. G. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, 2<sup>a</sup> edición (North Holland, Amsterdam, 1992).
- [3] M. Alonso y E. J. Finn, *Física*, 1<sup>a</sup> edición, vol. 2 (Addison-Wesley Iberoamericana, México, 1986).
- [4] A. Einstein, *Investigations on the Theory of the Brownian Movement* (Dover Publications, New York, 1956).
- [5] C. W. Gardiner, *Handbook of stochastic methods for physics, chemistry and the natural sciences*, 3<sup>a</sup> edición, Springer Series in Synergetics (Springer-Verlag, Berlin, 2004).
- [6] D. T. Gillespie, *Markov processes : an introduction for physical scientists* (Academic Press, San Diego, 1992).
- [7] M. R. Evans y S. N. Majumdar, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 160601 (2011).
- [8] M. R. Evans, S. N. Majumdar y G. Schehr, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **53**, 193001 (2020).
- [9] I. Gradshteyn e I. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products*, 7<sup>a</sup> edición (Academic Press, San Diego, 2007).
- [10] C. M. Bender y S. A. Orszag, *Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers I* (Springer, New York, 1999).
- [11] S. N. Majumdar, S. Sabhapandit y G. Schehr, *Physical Review E* **91**, 052131 (2015).
- [12] R. Mannella y V. Palleschi, *Physical Review A* **40**, 3381 (1989).

# Anexo I. Código para la simulación de la densidad de probabilidad

```
1 % Estudio de una partícula difusiva libre bajo la acción de
   resetting
2 % estocástico:
3 clear;clc;close all
4
5 % Introducimos los parámetros del sistema.
6
7 r = 1; % Tasa de resetting.
8 D = 1; % Coeficiente de difusión.
9 x_r = 0; % Posición de resetting.
10 x_0 = 0; % Posición inicial.
11
12 % Definimos las matrices donde almacenaremos la información
   de las
13 % trayectorias y los parámetros del problema:
14
15 dt = 0.005; % Longitud de cada paso temporal.
16 theta = sqrt(2*D*dt); % Salto difusivo.
17 t_final = 1.4; % Tiempo total de simulación.
18 t = 0:dt:t_final; % Variable temporal.
19 N_step = length(t) - 1; % Número de pasos de la simulación.
20 N_tray = 100000; % Número de trayectorias.
```

```

21 M = floor(N_step/14); % Contador para realizar capturas del
    histograma.
22 N = floor(N_step/14);
23 s = zeros(1,1 + N_step/M); % Matriz de valores esperados.
24 s_var = zeros(1,1 + N_step/M); % Matriz de momentos de
    segundo orden.
25
26 % Para el histograma:
27
28 x_min = -6.04; % Límite inferior de representación del
    histograma.
29 x_max = 6.04; % Límite superior de representación del
    histograma.
30 L = x_max - x_min; % Extensión total.
31 delta_x = 0.08; % Anchura de cada cajón del histograma.
32 N_bins = L./delta_x; % Número de cajones.
33 x_bordes = x_min + (0:N_bins).*delta_x; % Vector que delimita
    cada uno de los cajones del histograma.
34 H = zeros(N_step./N + 1,N_bins); % Matriz de histogramas.
35
36 % Importamos los datos obtenidos de forma numérica:
37
38 H_num = importdata('datos.mat');
39 x_num = H_num(:,1);
40
41 %% Simulación de las trayectorias:
42
43 for i = 1:N_tray
44     x = x_0;
45     s(1) = s(1) + x;
46     s_var(1) = s_var(1) + x.^2;

```

```

47     b = floor((x-x_min)./delta_x) + 1; % Cajón asignado al
        valor de x para un j dado.
48     H(1,b) = H(1,b) + 1; % Añade una cuenta en el cajón
        correspondiente.
49     tau = (1./r).*log(1/rand(1,1));
50 for j=1:length(t)
51     if t(j)< tau
52         x = x + theta.*randn(1,1);
53     else
54         x = x_r;
55         tau = tau + (1./r)*log(1/rand(1,1));
56     end
57     if mod(j,M) == 0
58         s(1+j./M) = s(1+j./M) + x;
59         s_var(1+j./M) = s_var(1+j./M) + x.^2;
60     if mod(j,N) == 0 && abs(x) < x_max
61         b = floor((x-x_min)./delta_x) + 1; % Cajón asignado
            al valor de x para un j dado.
62         H(j./N + 1,b) = H(j./N + 1,b) + 1; % Añade una cuenta
            en el cajón correspondiente.
63     end
64 end
65 end
66 end
67
68 s = s./N_tray;
69 s_var = s_var./N_tray;
70 H = H./(N_tray*delta_x);
71
72 %% Representaciones gráficas
73
74 x_teo = linspace(-6,6,1000);

```

```

75
76 alpha_0 = (r./D)^(1/2);
77
78 pdf_teo = @(a) (alpha_0./2).*exp(-alpha_0.*abs(a-x_r));
79
80 for i=2:length(H_num(1,:))
81
82 figure (i+1)
83
84 plot(x_bordes(1:end-1)+0.5*delta_x,H(i,:), 'ro', 'Markersize '
      ,9)
85 hold on
86 plot(x_num,H_num(:,i), 'b', 'LineWidth',2)
87 plot(x_teo,pdf_teo(x_teo), 'k--', 'LineWidth',2)
88 xlabel('$x$', 'interpreter', 'latex', 'FontSize',22);
89 ylabel('$P(x,t)$', 'interpreter', 'latex', 'FontSize',22);
90 ylim([0 1]); yticks([0 0.25 0.5 0.75 1]);
91 hold off
92 end

```

## Anexo II. Código para la simulación del tiempo de primer paso

```
1 %% Simulación del tiempo medio de primer paso.
2 clear;clc;
3
4 r = [1,1.5,2,2.2,2.4,2.5,2.6,3,4]; % Tasa de resetting.
5 D = 1; % Coeficiente de difusión.
6 x_r = 1; % Posición de resetting.
7 x_0 = 1; % Posición inicial
8
9 dt = 1e-2; % Longitud de cada paso temporal.
10 N_tray = 1e5; % Número de trayectorias.
11 theta = sqrt(2*D*dt);
12 T = zeros(1,length(r)); % Matriz de tiempos medios de priemr
    paso.
13 T2 = zeros(1,length(r)); % Matriz de tiempos de segundo orden
    .
14 xabs = 0; % Posición del punto absorbente.
15
16 for k = 1:length(r)
17
18     for i = 1:N_tray
19         x = x_0;
20         tau = (1./r(k))*log(1/rand(1,1));
21         t = 0;
```

```

22 while x > xabs
23     t=t+dt;
24     if t < tau
25         x = x + theta.*randn(1,1);
26     else
27         x = x_r;
28         tau = tau + (1./r(k)).*log(1/rand(1,1));
29     end
30 end
31
32 T(k) = T(k) + t;
33 T2(k) = T2(k) + t.^2;
34 end
35 T(k) = T(k)./N_tray;
36 T2(k) = T2(k)./N_tray;
37 end
38
39 %% Representaciones gráficas.
40
41 % Para T y la desviación estándar (std):
42
43 load('T_vs_r_(1e-2)')
44
45 std = sqrt(T2-T.^2)./sqrt(N_tray); % Desviación estándar de
    la VE "T".
46 errorbar(r,T,3.*std,'ro','Markersize',9)
47 hold on
48 clear
49
50 load('T_vs_r_(1e-3)')
51
52 std = sqrt(T2-T.^2)./sqrt(N_tray);

```

```

53 errorbar(r,T,3.*std,'m*','Markersize',9)
54 clear
55
56 load('T_vs_r_(1e-4)')
57
58 std = sqrt(T2-T.^2)./sqrt(N_tray);
59 errorbar(r,T,3.*std,'gdiamond','Markersize',9)
60 clear
61
62 load('T_vs_r_(1e-5)')
63
64 std = sqrt(T2-T.^2)./sqrt(N_tray);
65 errorbar(r,T,3.*std,'ksquare','Markersize',9)
66
67 % Para T analítico:
68
69 xx = linspace(0.5,5);
70 T_teo = @(t) (1./t).*(exp(sqrt(t))-1);
71 plot(xx,T_teo(xx),'b','Linewidth',1.5)
72 xticks([0.5,1.5,2.5,3.5,4.5])
73 xlim([0.5 4.5])
74 yticks([1.5,1.6,1.7,1.8,1.9,2])
75 ylim([1.5,2.05])
76 xlabel('$r$', 'interpreter', 'latex', 'FontSize', 19)
77 ylabel('$\langle T \rangle$', 'interpreter', 'latex', 'FontSize'
    ,19)
78 hold off

```