



Luiz Menon Junior

**Reposicionamento estocástico e difusão
heterogênea: efeitos sobre busca aleatória e
sobrevivência de populações**

Tese de Doutorado

Tese apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor em Física pelo Programa de Pós-graduação em Física, do Departamento de Física da PUC-Rio

Orientadora: Profa. Celia Beatriz Anteneodo de Porto

Rio de Janeiro
Agosto de 2025



Luiz Menon Junior

**Reposicionamento estocástico e difusão
heterogênea: efeitos sobre busca aleatória e
sobrevivência de populações**

Tese apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor em Física pelo Programa de Pós-graduação em Física da PUC-Rio . Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo:

Profa. Celia Beatriz Anteneodo de Porto

Orientadora
Departamento de Física – PUC-Rio

Prof. Daniel Adrian Stariolo

UFF

Profa. Leticia Ribeiro de Paiva

Universidade Federal de São João Del-Rei

Prof. Marcos Gomes Eleuterio da Luz

UFPR

Profa. Zochil González Arenas

UERJ

Rio de Janeiro, 21 de agosto de 2025

Todos os direitos reservados. A reprodução, total ou parcial do trabalho, é proibida sem a autorização da universidade, do autor e do orientador.

Luiz Menon Junior

Bacharel em Física pela UEPG e Mestre em Física pela UFPR.

Ficha Catalográfica

Menon Junior, Luiz

Reposicionamento estocástico e difusão heterogênea: efeitos sobre busca aleatória e sobrevivência de populações / Luiz Menon Junior; orientadora: Celia Beatriz Anteneodo de Porto. – 2025.

126 f: il. color. ; 30 cm

Tese (doutorado) - Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Física, 2025.

Inclui bibliografia

1. Física – Teses. 2. Busca aleatória. 3. Difusão heterogênea. 4. Dinâmica de populações. 5. Reposicionamento estocástico. I. Anteneodo, Celia. II. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Física. III. Título.

CDD: 004

Esta tese é dedicada à minha família

Agradecimentos

A conclusão desta tese não teria sido possível sem a contribuição, direta ou indireta, de inúmeras pessoas.

Gostaria de agradecer, primeiramente, à minha orientadora, professora Célia Anteneodo, pela paciência (principalmente), por todos os ensinamentos, pela amizade e pelo exemplo inspirador que sempre ofereceu.

Agradeço ao Maike A. F. dos Santos pela amizade, pelos inúmeros ensinamentos e pelas colaborações.

Agradeço ao Pablo de Castro pela colaboração.

Agradeço aos meus pais, Luiz e Luzana, pelo constante incentivo. Este trabalho não teria sido possível sem o apoio deles.

Agradeço à minha esposa, Ariane, pelo amor, pela amizade e pelo seu incondicional apoio neste período.

Agradeço aos meus familiares, pelo incentivo e pelo carinho.

Agradeço aos meus amigos e colegas da PUC-Rio, especialmente aos que compartilharam comigo este período de pós-graduação. Agradeço pelas conversas, pelos almoços, pelos cafés e por me ouvirem.

Agradeço aos meus amigos, cuja maioria está distante geograficamente, mas que sempre se fizeram presentes pelos meios disponíveis. Agradeço o carinho e o apoio que sempre prestaram.

Agradeço aos professores do Departamento de Física da PUC-Rio por sua incessante dedicação e por todo o suporte prestado.

Agradeço aos demais trabalhadores da PUC-Rio, incluindo as pessoas das secretarias, da limpeza e do bandejão, com quem convivi ao longo desses anos, cuja dedicação é essencial para o pleno funcionamento da universidade.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001, e também com o apoio do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

Resumo

Menon Junior, Luiz; Anteneodo, Celia. **Reposicionamento estocástico e difusão heterogênea: efeitos sobre busca aleatória e sobrevivência de populações**. Rio de Janeiro, 2025. 126p. Tese de Doutorado – Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Processos estocásticos são fundamentais para a descrição de fenômenos naturais e artificiais em diferentes escalas espaciais e temporais. Em particular, a dinâmica estocástica desempenha um papel essencial em contextos como a busca por alvos, pois a estratégia de percorrer o espaço de maneira aleatória pode reduzir o tempo necessário para encontrar um determinado alvo. Na dinâmica de populações, processos estocásticos influenciam aspectos demográficos, como eventos de reprodução, morte e migração, além de condições ambientais, como a disponibilidade de recursos.

Neste contexto, abordamos o problema de buscas aleatórias por alvo único em um ambiente unidimensional heterogêneo. Essa heterogeneidade é modelada por meio de um coeficiente de difusão não uniforme, que varia espacialmente. Analisamos a distribuição dos tempos de primeira passagem até o alvo, e em particular alguns momentos dessa distribuição que permitem definir a eficiência da busca. Tal análise foi feita para diferentes formas do coeficiente de difusão e da interpretação da integração estocástica do ruído multiplicativo associado. Investigamos três diferentes cenários: busca em um domínio ilimitado, em um domínio limitado com fronteira refletora, e o caso em que a dinâmica de busca está sujeita ao reposicionamento estocástico. Uma característica presente em todos estes casos, é que, para perfis da difusividade que variam monotonicamente no espaço, quando a difusividade aumenta a partir da posição do alvo, processos mais antecipativos resultam em tempos de chegada mais curtos, enquanto o oposto ocorre quando a difusividade decresce a partir do alvo, tornando mais eficientes os processos menos antecipativos. Também identificamos relações de simetria entre a escolha da interpretação do ruído e a forma do coeficiente de difusão. No cenário com reposicionamento, identificamos regiões do espaço de parâmetros onde essa dinâmica é vantajosa. Nesses casos, há uma taxa ótima de reposicionamento que minimiza o tempo médio de chegada ao alvo, dependendo da forma do coeficiente de difusão e da interpretação do ruído.

Com relação ao reposicionamento estocástico, investigamos seus efeitos também no problema do tamanho mínimo de um fragmento de habitat, necessário para garantir a sobrevivência da população. Essa dinâmica, em que cada organismo retorna intermitentemente a uma posição fixa comum, modela comportamentos como retorno ao ninho, a busca por refúgio ou o deslocamento em direção a recursos essenciais. Em geral, os modelos propostos para esse tipo de problema assumem uma dinâmica de dispersão puramente difusiva; no entanto, outras formas de movimento podem provocar alterações significativas nos resultados, como demonstramos ser o caso com a incorporação de reposicionamentos estocásticos. Derivamos analiticamente tanto o crescimento populacional ao longo do tempo quanto o tamanho crítico do fragmento e nossos resultados foram validados por simulações baseadas em agentes, com excelente concordância. Mostramos que o reposicionamento estocástico pode tanto aumentar quanto diminuir o tamanho crítico do fragmento, dependendo da taxa com que estes eventos acontecem, da posição para a qual os indivíduos retornam e da hostilidade ambiental externa. Esses resultados destacam como realocações intermitentes moldam limiares ecológicos e podem fornecer subsídios relevantes para a modelagem ecológica e o planejamento da conservação, especialmente em paisagens fragmentadas, como regiões desmatadas.

Palavras-chave

Busca aleatória; Difusão heterogênea; Dinâmica de populações; Reposicionamento estocástico.

Abstract

Menon Junior, Luiz; Anteneodo, Celia (Advisor). **Stochastic resetting and heterogeneous diffusion: effects on random search and population survival**. Rio de Janeiro, 2025. 126p. Tese de Doutorado – Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Stochastic processes are fundamental for describing natural and artificial phenomena at different spatial and temporal scales. In particular, the stochastic dynamics plays a crucial role in contexts such as target searching, as the strategy of randomly traversing space can reduce the time required to find a given target. In population dynamics, stochastic processes influence demographic aspects such as reproduction, death, and migration, as well as environmental conditions such as resource availability.

In this context, we address the problem of random searches for a single target in a heterogeneous one-dimensional environment. This heterogeneity is modeled using a non-uniform diffusion coefficient that varies spatially. We analyze the distribution of first-passage times to the target, and in particular some moments of this distribution that allow us to define the efficiency of the search. This analysis was performed for different forms of the diffusion coefficient and the interpretation of the stochastic integration of the associated multiplicative noise. We investigate three different scenarios: searching in an unbounded domain, in a bounded domain with a reflective boundary, and the case in which the search dynamics are subject to stochastic resetting. A characteristic present in all these cases is that, for diffusivity profiles that vary monotonically in space, when diffusivity increases from the target position, more anticipatory processes result in shorter arrival times, while the opposite occurs when diffusivity decreases from the target, making less anticipatory processes more efficient. We also identified symmetry relationships between the choice of noise interpretation and the shape of the diffusion coefficient. In the scenario with resetting, we identified regions of the parameter space where this dynamic is advantageous. In these cases, there is an optimal resetting rate that minimizes the mean arrival time to the target, depending on the shape of the diffusion coefficient and the noise interpretation.

Regarding stochastic resetting, we also investigated its effects on the problem of determining the minimum habitat fragment size required to ensure population survival. This dynamic, in which each organism intermittently returns to a common fixed position, shapes behaviors such as nesting, refuge-seeking, or movement toward essential resources. In general, models proposed for this type of problem assume purely diffusive dispersal dynamics; however, other forms of movement can significantly alter the results, as we demonstrate with the incorporation of stochastic relocations. We analytically derived both population growth over time and critical fragment size, and our results were validated by agent-based simulations, with excellent agreement. We show that stochastic resetting can either increase or decrease critical fragment size, depending on the rate of these events, the position to which individuals return, and external environmental hostility. These results highlight how intermittent relocations shape ecological thresholds and can provide relevant insights for ecological modeling and conservation planning, especially in fragmented landscapes, such as deforested regions.

Keywords

Random search; Heterogeneous diffusion; Population dynamics; Stochastic resetting.

Sumário

1	Introdução	19
2	Formulações e técnicas em processos estocásticos	24
2.1	Variáveis aleatórias, distribuições e processos de Markov	24
2.2	Equação de Langevin	27
2.3	Equação de Fokker-Planck	30
2.4	Transformação de Lamperti	33
2.5	Processos de primeira passagem	34
2.6	Busca aleatória como um problema de primeira passagem	36
2.7	Métodos computacionais	37
3	Busca aleatória em meios heterogêneos semi-infinitos	40
3.1	Busca aleatória em meios com difusividade do tipo potência sob diferentes interpretações	40
3.2	Busca aleatória no cenário de Stratonovich	47
3.3	Conclusão do capítulo	57
4	Busca aleatória em meios heterogêneos finitos	58
4.1	Eficiência de busca sob a interpretação de Stratonovich	58
4.2	Eficiência de busca sob interpretações arbitrárias	64
4.3	Conclusão do capítulo	67
5	Busca aleatória sujeita a reposicionamento estocástico em meios heterogêneos	69
5.1	O modelo	69
5.2	Perfis de difusividade linear com interpretações arbitrárias	70
5.3	Difusividade arbitrária $D(x)$	74
5.4	Outras condições	79
5.5	Conclusão do capítulo	81
6	Tamanho crítico do habitat para uma população de indivíduos sujeitos a reposicionamentos estocásticos	83
6.1	Modelo	84
6.2	Ambiente externo totalmente hostil	86
6.3	Ambiente parcialmente hostil	92
6.4	Conclusão do capítulo	97
7	Considerações finais	98
A	Algumas definições	101
A.1	Formula de Itô	101
A.2	Transformada de Laplace	101
B	Material suplementar do Capítulo 3	103
B.1	Solução da Eq. (3-7)	103

C	Material suplementar do Capítulo 4	105
C.1	Probabilidade de sobrevivência no espaço de Laplace ($A = 1$)	105
C.2	Inversão de Laplace para a DTPP ($A = 1$)	105
C.3	TMPP para A arbitrário	106
C.4	Probabilidade de sobrevivência para $D(x) = ax + b$	107
D	Material suplementar do Capítulo 5	109
D.1	Equações de Fokker-Planck	109
D.2	TMFP para perfis lineares	111
D.3	Aproximações assintóticas	112
D.4	Duas fronteiras absorventes	114
E	Material suplementar do Capítulo 6	115
E.1	Resolvendo a Eq. (6-5)	115
E.2	Resolvendo a forma estacionária da Eq. (6-5)	116
E.3	Solução estacionária para um ambiente parcialmente hostil	116
E.4	Diagramas de fase	118
F	Referências bibliográficas	119

Lista de figuras

- Figura 3.1 Trajetórias aleatórias com $D(x) = D_0 x^\alpha$ e uma fronteira absorvente em $x = 0$ (linha tracejada), para $\alpha = -0.5$ (a) e $\alpha = 0.5$ (b). Adotamos $D_0 = 1.0$, $x_0 = 1.5$, e a integração da Eq. (2-33) foi feita utilizando o método de Euler. Em cada painel, a mesma sequência aleatória foi usada, para fins de comparação. 41
- Figura 3.2 Distribuição do tempo de primeira passagem (DTPP) dada pela Eq. (3-11) (linhas contínuas) e a partir de 10^5 trajetórias obtidas da Eq. (2-33) com fronteira absorvente em $x = 0$ (símbolos), para o HDP com $D(x) = D_0 x^\alpha$. Os painéis (a) e (b) correspondem a $\alpha = -0.5$ e $\alpha = 0.5$, respectivamente. Em todos os casos $x_0 = 1.0$ e $D_0 = 1.0$. Nas simulações, para $t < 1$ foi usado $dt = 10^{-4}$, e para $t \geq 1$ foi usado $dt = 10^{-2}$. 44
- Figura 3.3 Eficiência versus α para diferentes interpretações do PDH (valores de A indicados na legenda), usando $D(x) = D_0 x^\alpha$, com $D_0 = 1$. Cada painel corresponde a um valor diferente de x_0 . A previsão dada pela Eq. (3-19) é mostrada por linhas contínuas, e a média sobre 10^5 realizações da Eq. (2-33) com fronteira absorvente em $x = 0$ é representada por símbolos. Em cada caso, é mostrada a média. A linha horizontal contínua corresponde ao valor homogêneo $\mathcal{E}_H = 2D_0/x_0^2$. 46
- Figura 3.4 Heterogeneidade localizada de largura w e amplitude h , ao redor do nível D_0 (Eq. (3-34)) representado pela linha tracejada. A linha pontilhada vertical destaca a posição inicial. 50
- Figura 3.5 Eficiência em função do parametro h para o perfil descrito na Eq. (3-34) e esquematizado na Fig. 3.4, para diferentes valores de w . Note que em todos os casos a eficiência é inferior à do caso homogêneo. As linhas horizontais correspondem a \mathcal{E}_H , o valor para o caso homogêneo com difusividade de mesmo nível médio. 51
- Figura 3.6 Eficiência para o perfil de difusividades descrito pela Eq. (3-34), variando h e w para diferentes interpretações. (a) Interpretação anti-Itô ($A = 0$). (b) Stratonovich $A = 1$. (c) Itô ($A = 2$). Nos casos (anti) Itô, painéis (a) e (c) os resultados foram obtidos a partir de integração numérica, representados pelas linhas tracejadas. Para o caso de Stratonovich, painel (b), além dos resultados numéricos representados pelas linhas tracejadas as soluções analíticas, obtidas pela Eq. (3-35), são representadas por linhas finas. Foram considerados $x_0 = 2.0$ e $\ell = 1.0$. 51
- Figura 3.7 (a) Perfil de difusividades em dois níveis descrito pela Eq. (3-36), com $\ell = h = \frac{1}{2}$. A linha preta indica o nível médio de difusividade. (b) Eficiência correspondente ao perfil de dois níveis. As linhas tracejadas foram obtidas numericamente, enquanto a linha preta contínua (apenas caso $A = 1$) corresponde a solução analítica dada pela Eq. (3-37). Com $x_0 = 0$, demais parâmetros correspondem aos descritos para o painel (a). 52

Figura 3.8 (a) Eficiência \mathcal{E} para $D(x) = D_0[1 + d \cos(kx)]$ em função de k , para diferentes valores de d . As linhas horizontais tracejadas correspondem ao respectivo limite de comprimentos de onda curtos dado pela Eq. (3-39). Fixamos $x_0 = 1$ e $D_0 = 1$. Na Fig. (b), plotamos \mathcal{E} em função de x_0 , para $k = 20\pi$, $D_0 = 1$ e $d = 0.85$. No gráfico em destaque, plotamos o limite de comprimento de onda curto \mathcal{E}_0 (linha tracejada) em função de d , e para comparação, a eficiência do caso homogêneo correspondente \mathcal{E}_H (linha horizontal fina).

54

Figura 3.9 Eficiência relativa $\mathcal{E}/\mathcal{E}_H$ versus d , utilizando diferentes valores de A , para os perfis (a) $D(x) = D_0[1 + d \cos(\pi x/x_0)]$ e (b) $D(x) = D_0[1 + d \cos(2\pi x/x_0)]$. Em todos os casos, a previsão dada pela Eq. (3-39) para o caso Stratonovich (linha tracejada) e o valor homogêneo (linha cheia horizontal), ambos normalizados por \mathcal{E}_H , estão representados. Os símbolos correspondem à média sobre 10^5 realizações do processo na Eq. (2-33), com condição de fronteira absorvente em $x = 0$. Os perfis de difusividade estão ilustrados nos gráficos em detalhe.

55

Figura 4.1 DTPP para um perfil de difusividade linear $D(x) = 1 + h(2x/L - 1)$ com $h = 0,8$. As linhas representam a solução analítica dada pela Eq. (4-6), enquanto os símbolos correspondem ao histograma obtido a partir de 10^5 trajetórias simuladas pela Eq. (2-33). (a) Caso com $L = 10$ e $x_0 = 1$. (b) Caso com $L = x_0 = 10$.

59

Figura 4.2 Eficiências na Interpretação de Stratonovich: $1/\langle t \rangle$ (grandes triângulos) e $\langle 1/t \rangle$ (grandes quadrados), usando as Eqs. (4-9) e (4-11), respectivamente, para os perfis de difusividade da forma $D(x) = 1 + d \cos(n\pi x/L)$, com $d = \pm 0.5$ (ilustrado no gráfico em detalhe $n = 4$) como função dos valores inteiros de n . Os símbolos pequenos representam as médias correspondentes sobre 10^6 realizações obtidas a partir da integração da Eq. (2-33), utilizando o método de Euler com passo de tempo $10^{-5} \leq \Delta t \leq 10^{-3}$. Em detalhe, incluímos um perfil embaralhado (após fragmentação em 200 segmentos), para o qual se obtemos os mesmos resultados. As linhas horizontais (sólida para $1/\langle t \rangle$ e tracejada para $\langle 1/t \rangle$) representam os valores para o caso homogêneo $d = 0$, que apresentam melhor desempenho do que o caso heterogêneo, segundo ambas as medidas.

62

Figura 4.3 Comportamento de $1/\langle t \rangle$ (linhas sólidas) e $\langle 1/t \rangle$ (linhas tracejadas), obtidos a partir das Eqs. (4-9) e (4-11), para o perfil linear de difusividade $D(x) = 1 + h(2x/L - 1)$, considerando diferentes valores de h . No painel (a), variamos a posição inicial x_0 , com $L = 10$ fixo. No painel (b), variamos a posição da fronteira L , mantendo $x_0 = 0,1$ fixo. Os símbolos correspondem aos resultados da integração da Eq. (2-33), com média sobre 10^6 trajetórias.

64

Figura 4.4 Eficiência $\langle t \rangle^{-1}$, obtida a partir da Eq. (4-18) (linhas sólidas) e de simulações estocásticas (símbolos), para o perfil de difusividade $D(x) = 1 + h(2x/L - 1)$ (mostrado no painel (b)), para diferentes valores de A , fixando $L = 1$, e (a) $x_0 = 1$ e (b) $x_0 = 0.6$. Observe no painel (a) que, como $x_0 = L$, trocar $x \leftrightarrow L - x$ é equivalente a trocar o parâmetro de interpretação A : $0 \leftrightarrow 2$, enquanto essa simetria é quebrada se $x_0 < L$, como ilustrado no painel (b).

66

Figura 4.5 Eficiência $\langle t^{-1} \rangle$ obtida a partir da Eq. (4-21) (linhas sólidas) e de simulações estocásticas (símbolos), com o mesmo perfil de difusividade e parâmetros utilizados na Fig. 4.4.

66

Figura 5.1 **Difusividade linear** $D(x) = 1 + \alpha(x - 1/2)$, com $\alpha = +1.5$ (laranja claro), $\alpha = -1.5$ (vermelho), e o caso homogêneo $\alpha = 0$ (preto), representados no detalhe de (c). (a) T em função de r , fornecido pela Eq. (5-9), para $x_0 = 0.4$ (símbolos preenchidos) e $x_0 = 0.7$ (vazados), considerando a interpretação de Stratonovich ($A = 1$). (b) Taxa de reposicionamento ótima r^* (que minimiza o TMPP) vs. x_0 , para diferentes valores de A indicados na legenda. O gráfico em detalhe mostra uma ampliação da região crítica em escala linear. (c) TMPP ótimo correspondente T^* vs. x_0 . Em todos os casos $x_r = x_0$. Os símbolos correspondem a simulações estocásticas (média sobre 10^4 trajetórias) da Eq. (5-2), e as linhas aos resultados teóricos.

72

Figura 5.2 **Difusividade oscilante** $D(x) = 1 + d \cos(2\pi x)$, com $A = 1$, representada no detalhe do painel inferior. (a) Taxa de reposicionamento ótima, r^* , e (b) correspondente TMPP ótimo, T^* , em função de x_0 , para $d = 0.9$ (laranja), $d = -0.9$ (vermelho) e $d = 0$ (preto). O detalhe em (a) é uma ampliação ao redor do valor crítico de x_0 . Em todos os casos, $x_r = x_0$.

74

Figura 5.3 **Difusividade oscilante** $D(x) = 1 + d \cos(6\pi x)$, com $A = 1$, representada no detalhe do painel inferior. (a) Taxa de reposicionamento ótima, r^* , e (b) correspondente TMPP ótimo, T^* , em função de x_0 , para $d = 0.9$ (laranja), $d = -0.9$ (vermelho) e $d = 0$ (linha preta sólida). A linha preta tracejada corresponde ao limite $k \gg 1$, insensível ao sinal de d . O gráfico em detalhe em (a) é uma ampliação ao redor do valor crítico de x_0 . Em todos os casos, $x_r = x_0$.

75

Figura 5.4 **Perfil linear** $D(x) = 1 - 0.9(x - 1/2)$, sob a interpretação de Itô ($A = 2$). TMPP T em função da taxa de reposicionamento r . As aproximações assintóticas, para pequenos valores de r dadas pela Eq. (5-18), até primeira ordem, e para grandes valores de r dadas pela Eq. (5-17), são mostradas, em bom acordo com a solução exata dada pela Eq. (5-9). $x_r = x_0 = 0.4$. O gráfico em detalhe mostra uma ampliação da região de transição entre as duas soluções.

76

Figura 5.5 (a) e (d): Diagramas de fases dados por $\text{sign}(T_1) \equiv dT/dr|_{r=0}$ em função de x_0 , para a difusividade oscilante $D(x) = 1 + d \cos(2\pi x)$ com $d = -0.9$ (laranja) e $d = 0.9$ (vermelho). Os perfis estão representados nos respectivos insets. TMPP em função de r para $(d, x_0) = (-0.9, 0.15)$ (b) e $(-0.9, 0.71)$ (c), $(d, x_0) = (0.9, 0.15)$ (e) e $(0.9, 0.71)$ (f). As curvas para $d = 0$ (preto) também são plotadas. As aproximações para r pequeno, dadas pela Eq. (5-18), e para r grande, dadas pela Eq. (5-17), também são mostradas. Em (e), o detalhe é uma ampliação do gráfico principal, para exibir os mínimos. Em todos os casos, $x_r = x_0$. Os símbolos correspondem a simulações estocásticas da Eq. (5-2).

78

Figura 5.6 **Difusividade linear** $D(x) = 1 + 1.9(x - 1/2)$, ilustrada no painel inferior (gráfico em detalhe), com fronteiras absorventes em $x = 0$ e $x = L = 1$. (a) Taxa ótima de reposicionamento r^* em função de x_0 , para diferentes valores de A indicados na legenda. (b) TMPP ótimo correspondente T^* versus x_0 . O caso homogêneo também é plotado para comparação (linhas pretas). Em todos os casos, $x_r = x_0$.

79

Figura 5.7 Linhas críticas. (a) **Difusividade linear** $D(x) = 1 + \alpha(x - 1/2)$, com $\alpha = 1.5$ (laranja) e $\alpha = -1.5$ (vermelho), para diferentes valores de A indicados na legenda. (b) **Difusividade oscilante** $D(x) = 1 \pm d \cos(6\pi x)$, para $d = 0.9$ (laranja), $d = -0.9$ (vermelho) e caso homogêneo $d = 0$ (preto), representados nos respectivos *insets*, para a prescrição de Stratonovich $A = 1$. A região abaixo de cada curva corresponde a $dT/dr|_{r=0} < 0$; caso contrário, $dT/dr|_{r=0} > 0$. Aqui $x_r = x_0$.

80

Figura 6.1 Representação esquemática do cenário espacial unidimensional (1D) utilizado aqui. Na região viável, chamada de mancha ou habitat, a taxa de crescimento é positiva. Essa região se estende de $x = -\ell$ até $x = \ell$. Na região ao redor, há condições hostis, implicando uma taxa de crescimento negativa. A trajetória (tempo na direção vertical) mostra um passeio aleatório (preto) com reinicialização para a posição x_r (vermelho).

84

Figura 6.2 Evolução temporal do tamanho total da população $N(t)$ normalizado pelos valores iniciais N_0 , quando a meia largura é $\ell = 1.5$, $x_0 = 0$ e $x_r = 0$ para da taxa de reposicionamento r indicados na legenda. Os símbolos referem-se à média de 10^5 simulações estocásticas das Eqs. (6-1) e (6-2) com $dt = 10^{-5}$. As linhas sólidas finas são obtidas por inversão numérica da Eq. (E-4) [1], enquanto as linhas tracejadas correspondem à aproximação de tempos longos fornecida por Eq. (6-6). No caso particular $r = 0$, também mostramos (linha pontilhada) a expressão analítica conhecida [2,3], e $s_M = s_0 = 1 - (\pi/3)^2$ (ver Apêndice E.1). Para $r > 0$, os valores de s_M são obtidos numericamente e são $s_{0.5} \approx 0.0281$, $s_{2.0} \approx 0.2993$.

86

Figura 6.3 (a) Meia largura crítica ℓ_c como função da taxa de reposicionamento r para diferentes valores de $|x_r|$ indicados na legenda. As linhas sólidas são dadas pela Eq. (6-7). A linha pontilhada horizontal corresponde ao valor crítico na ausência de reposicionamento ($r = 0$). A linha tracejada é dada pela Eq. (6-9). (b) Diagrama no espaço de parâmetros (x_r, r) mostrando a região (duplamente hachurada) onde o reposicionamento reduz o tamanho crítico da região. A linha preta sólida corresponde ao r^* finito para o qual $\ell_c(r, x_r) = \ell_c(0, x_r)$ como função de x_r . Para além de $|x_r| = \ell_c^* = \pi/2$, a redução do tamanho crítico não pode ser alcançada para nenhum valor de r . Como explicado na Seção 6.3, as linhas coloridas representam r^* vs. x_r para valores finitos de a .

88

Figura 6.4 Distribuição de densidade estacionária para $r = 10$ (a) e $r = 0.5$ (b), $x_r = 0.0, 0.5$ e 1.0 , nos valores críticos do tamanho do habitat $2\ell_c$ (ver Fig. 6.3(a)). A curva tracejada corresponde ao estado estacionário para $r = 0$, apresentada para comparação. Em todos os casos, $a_{\text{ex}} \rightarrow \infty$. As linhas são fornecidas pela Eq. (6-11) e os símbolos são obtidos por simulação estocástica da Eq. (6-1) com 10^5 realizações e $dt = 10^{-5}$. Os painéis internos mostram o valor estacionário da população total por unidade de comprimento em função de $|x_r|$, quando a densidade inicial é $N_0 = 1$.

90

Figura 6.5 Distribuição de densidade estacionária, quando a distribuição inicial é uma delta de Dirac centrada em x_0 , para diferentes valores de x_0 indicados na legenda. Também, $r = 10$ e as posições de reposicionamento são (a) $x_r = 0$ e (b) $x_r = 1$. O caso em que a distribuição inicial é uniforme também é mostrada para comparação (linha tracejada preta).

91

Figura 6.6 Reposicionamento a partir de qualquer local. Meia largura crítica ℓ_c como função da taxa r , (a) para diferentes valores de a quando $x_r = 0$, e para $a = 2$ (b) e $a = 0.1$ (c) para diferentes valores de $|x_r|$. Linhas contínuas são fornecidas pela Eq. (6-13), para $x_r \in \Omega_{\text{in}}$. Linhas tracejadas são obtidas resolvendo numericamente a Eq. (6-14), com $x_r \in \Omega_{\text{ex}}$. Em (b), a linha horizontal pontilhada representa a meia largura crítica na ausência de reinicialização.

93

Figura 6.7 Reposicionamento apenas a partir da região externa. Meia largura crítica ℓ_c como função da taxa r , (a) para diferentes valores de a , com $x_r = 0$, para $a = 10$ (b) e $a = 0.1$ (c) com diferentes valores de $|x_r|$. Linhas contínuas são fornecidas pela Eq. (6-17), para $x_r \in \Omega_{\text{in}}$. Linhas tracejadas são obtidas resolvendo numericamente a Eq. (6-18), para $x_r \in \Omega_{\text{ex}}$. Em (b), a linha horizontal pontilhada representa a meia largura crítica na ausência de reinicialização. O painel interno mostra um detalhe para o caso $x_r = 1.3$.

94

Figura 6.8 Diagrama para o reposicionamento parcial no espaço de parâmetros (x_r, r) mostrando as linhas que delimitam a região (à esquerda das curvas) onde o reposicionamento reduz o tamanho crítico do fragmento, dada pela condição $\ell_c(r, x_r) = \ell_c^*$, como na Fig. 6.3(b). No caso $a \rightarrow \infty$, a região com hachura dupla à esquerda da linha $x_r = \ell_c^* = \pi/2$ permite redução do tamanho crítico para qualquer taxa, o que ocorre para $x_r \in \Omega_{\text{in}}$. Para diferentes valores de a , é exibida a curva r^* em função de $|x_r|$.

96

Figura E.1 Diagramas no plano x_r-r , para reposicionamento total, com $\Omega = \Omega_{\text{in}} \cup \Omega_{\text{ex}}$ (linha superior), e reposicionamento parcial, com $\Omega = \Omega_{\text{ex}}$ (linha inferior). Cada um dos três valores distintos de a corresponde a uma coluna, com cores correspondentes às das Figs. 6.6(a) e 6.7(a). A região sombreada é onde o RE o tamanho crítico do habitat, delimitada pela condição $\ell_c(r, x_r) = \ell_c^*$, representada por linha tracejada quando $x_r \in \Omega_{\text{out}}$ ou linha contínua quando $x_r \in \Omega_{\text{in}}$. A região duplamente hachurada (ou hachurada) corresponde à redução do tamanho crítico pelo RE quando x_r pertence (ou não) ao habitat, as quais são delimitadas pela condição $\ell_c = x_r$, dado que $\ell_c < \ell_c^*$ (linha contínua fina).

118

Lista de Acrônimos

CK	–	Chapman-Kolmogorov
DTPP	–	Distribuição de tempos de primeira passagem
EDE	–	Equação diferencial estocástica
PDF	–	Função densidade de probabilidade
PDH	–	Processo difusivo heterogêneo
RE	–	Reposicionamento estocástico
TMPP	–	Tempo médio de primeira passagem

“O lugar não importa...”

Disse Alice.

*“Então não importa o
caminho que você vai tomar”,
disse o Gato*

Lewis Carroll, *Alice no País das Maravilhas*.

1

Introdução

O uso de processos estocásticos para descrever fenômenos físicos teve início a partir da observação de flutuações na dinâmica de partículas em sistemas mesoscópicos, a escala intermediária entre o mundo microscópico e o macroscópico. Nessa escala, as partículas são grandes o bastante de modo que não são influenciadas por fenômenos quânticos, mas pequenas o suficiente para sofrerem influência dos incessantes choques moleculares do meio. Um exemplo paradigmático é o movimento browniano, que descreve os movimentos erráticos de partículas coloidais suspensas em fluidos. A descrição teórica desse fenômeno foi introduzida por Einstein em 1905 [4], em um trabalho que inaugurou alguns dos principais conceitos que fundamentam a teoria moderna de processos estocásticos [5] e da mecânica estatística de não equilíbrio [6].

Além de oferecer uma base teórica para o movimento browniano, a teoria dos processos estocásticos aprimorou-se rapidamente e mostrou-se útil na descrição de uma variedade de fenômenos em diferentes escalas. Os exemplos vão desde o nível molecular, como processos bioquímicos ou mecanismos relacionados a sistemas biológicos como o transporte celular e a expressão gênica [7], até escalas macroscópicas, como na dinâmica estelar [8].

Esta tese se concentra em dois contextos nos quais a dinâmica estocástica exerce um papel fundamental: as buscas aleatórias e a dinâmica de populações. No primeiro caso, investigamos processos em que um indivíduo (caminhante) percorre o espaço de forma aleatória em busca de um alvo cuja localização é desconhecida. No segundo, abordamos modelos populacionais nos quais os mecanismos que regem o nascimento, morte e interação entre indivíduos possuem natureza probabilística.

Os temas centrais do nosso estudo incluem: buscas aleatórias, processos multiplicativos, reposicionamento estocástico, e a dinâmica de dispersão e crescimento populacional. Cada um desses tópicos será detalhado nas seções que se seguem.

Buscas aleatórias

As buscas aleatórias, ou buscas por alvos, tem ganhado interesse crescente nos últimos anos e vêm sendo investigadas tanto do ponto de vista teórico e fundamental quanto em aplicações. As primeiras investigações em problemas desta classe se iniciaram já nos primeiros trabalhos em física estatística fora

do equilíbrio [9]. Marian von Smoluchowski investigou, em 1917, a dinâmica de duas partículas distintas que se difundem em um solvente e coagulam ao se encontrarem [10]. A pergunta central era: quanto tempo leva até que as partículas coagulem? A resposta está no tempo necessário para que elas se encontrem pela primeira vez, que é um tempo aleatório denominado tempo de primeira passagem [11]. Outro exemplo clássico envolvendo tempos de primeira passagem é o trabalho de Kramers, desenvolvido na década de 1940. No contexto da ativação térmica de reações químicas, ele investigou a taxa de escape de uma partícula sujeita a ruído térmico em um potencial com barreira, sendo essa taxa o inverso do tempo médio de chegada ao topo da barreira.

Ambos os exemplos podem ser interpretados como problemas de busca. No primeiro uma partícula da substância A tem como objetivo encontrar a partícula alvo de substância B ou vice-versa (neste encontro ocorre a coagulação). O segundo uma partícula browniana busca alcançar determinado ponto alvo de modo a superar a barreira de potencial. Estes são alguns casos mas os alvos e os agentes que os buscam podem ser os mais diversos, em diferentes escalas de tamanho e tempo e presentes em diversos fenômenos naturais e artificiais. Os exemplos são numerosos: proteínas capazes de localizar sequências ou estruturas-alvo específicas em meio a uma enorme quantidade de DNA [12, 13]; animais em busca de parceiros reprodutivos, recursos ou refúgios [14–19]; a busca visual por um elemento em uma imagem [20, 21]; a busca por um mínimo de uma função em problemas de otimização [22].

Estudos nessa área podem contribuir com estratégias eficientes para explorar ambientes complexos e identificar alvos [23]. Um dos principais focos é entender quais fatores determinam o sucesso da busca e de que forma eles influenciam o processo, facilitando ou dificultando a localização do alvo. Entre esses fatores, destacam-se as heterogeneidades espaciais do meio, que afetam a mobilidade do agente alterando a dinâmica de busca. Estas heterogeneidades podem ser modeladas a partir de processos difusivos heterogêneos.

Processo difusivo heterogêneo

Processos difusivos heterogêneos (PDHs) ocorrem em meios nos quais o coeficiente de difusão apresenta variações locais [24]. Nesses casos, a difusividade é uma função das coordenadas espaciais (ou estados) [25], refletindo a estrutura não uniforme do meio. A difusividade dependente de estado aparece na descrição de muitos sistemas físicos que exibem uma complexidade espacial dando origem a fenômenos como difusão anômala [26] e quebra de ergodicidade [25]. Também aparece na modelagem de sistemas biológicos, so-

cioeconômicos, ecológicos, entre outros.

Um aspecto fundamental no tratamento de PDHs é a necessidade de escolher uma interpretação estocástica para a equação diferencial associada a dinâmica microscópica. Esta necessidade surge a partir da arbitrariedade de como a discretização do ruído multiplicativo é feita. Assim, diferentes esquemas de discretização — como os de Itô, Stratonovich ou Hänggi-Klimontovich (anti-Itô) — levam a resultados distintos. Não existe uma estritamente correta, ela é guiada pelo sistema a ser modelado. Por exemplo, em sistemas coloidais próximos a paredes, evidências experimentais indicam que a interpretação de Hänggi-Klimontovich é a mais adequada [27, 28], enquanto em modelos financeiros, a interpretação de Itô é a mais utilizada [29]. Já a interpretação de Stratonovich é usada em contextos onde o movimento exibe correlações de tempo finito como é caso de sistemas sujeitos a efeitos inerciais ou regidos por um ruído colorido [30, 31].

Reposicionamento estocástico

No contexto de partículas difusivas, o reposicionamento estocástico caracteriza-se como um mecanismo pelo qual, em intervalos de tempo aleatórios, a partícula é instantaneamente transportada para um local fixo predeterminado. Este protocolo foi originalmente proposto por Evans e Majumdar [32–34] e rapidamente se consolidou como uma linha de pesquisa de grande interesse na comunidade de física estatística. A introdução dessa dinâmica simples a um processo difusivo faz com que o sistema passe a exibir diversas características interessantes. Uma delas é o surgimento de um estado estacionário fora do equilíbrio, algo que não ocorre na difusão livre [32]. Outra, no contexto de buscas aleatórias, é a existência de uma taxa ótima de reposicionamento que minimiza o tempo médio necessário para que o caminhante atinja um alvo [33]. Outras propriedades também têm sido reportadas [35, 36]. Esse mecanismo também tem sido utilizado na modelagem de sistemas ecológicos, como colapsos populacionais [37] e interações predador-presa [38, 39].

Dinâmica de populações

A dinâmica de populações é o estudo de como e por que o número de indivíduos em uma população muda no tempo e no espaço [40]. Um dos modelos mais celebrados para o estudo de dispersão e crescimento populacional é o modelo de Fisher-Kolmogorov [41], que consiste numa equação de reação-difusão em que o termo difusivo representa o deslocamento dos indivíduos e o

termo de reação, geralmente não linear, modela o crescimento e a competição intraespecífica. Esse tipo de abordagem é amplamente utilizado para descrever uma variedade de fenômenos ecológicos.

Entre essas aplicações, destaca-se o estudo da resiliência dos habitats fragmentados, em particular o problema do tamanho crítico de um *patch* (ou fragmento). Esse problema envolve determinar a área mínima necessária para que uma população de indivíduos dispersantes consiga se manter em um habitat cercado por um ambiente hostil ou desfavorável [42–45]. É um conceito fundamental na dinâmica espacial de populações, essencial para compreender a persistência de espécies em paisagens fragmentadas [46] e para desenvolver estratégias que mitiguem seus impactos [47–49]. O tamanho crítico surge do balanço entre crescimento da população na região viável e a perda de indivíduos por dispersão no ambiente hostil [50].

Na formulação mais simples, esse problema é modelado por uma equação de reação-difusão com condições de contorno absorventes [3].

O problema do tamanho crítico tem sido examinado sob diversas condições, incluindo ambientes inóspitos [51–53], estocasticidade nas condições ambientais [54, 55], oscilações periódicas [56, 57], e a presença de viés no movimento [58], entre outras [59]. Esses estudos fornecem informações sobre como diferentes fatores ambientais influenciam a persistência populacional.

Objetivos e organização da tese

A tese está dividida em dois eixos principais. O primeiro trata de buscas aleatórias em ambientes heterogêneos, enquanto o segundo aborda o problema do tamanho crítico de um habitat em dinâmicas populacionais. A primeira parte corresponde aos Capítulos 3, 4 e 5, e a segunda ao Capítulo 6.

Nos problemas de busca, nosso objetivo principal é compreender como a heterogeneidade do meio afeta o tempo necessário para encontrar um alvo. Investigamos tanto o papel do perfil espacial da difusividade quanto a influência da interpretação associada ao processo multiplicativo. Em particular, buscamos entender se a heterogeneidade do meio pode, de alguma forma, tornar a busca mais eficiente. Também analisamos o efeito do reposicionamento estocástico (*resetting*) nesse tipo de ambiente, com o objetivo de identificar sob quais condições o reinício reduz ou otimiza o tempo de busca, considerando diferentes formas de heterogeneidade e distintas interpretações do cálculo estocástico.

Na segunda parte, exploramos o impacto do reposicionamento estocástico da posição indivíduos de uma população confinada a um fragmento do habitat. A questão central neste capítulo se encaixa no problema do tamanho crítico

do habitat, cujo objetivo é determinar o tamanho mínimo para a sobrevivência de uma população.

Neste contexto, a tese está organizada da seguinte forma: no Capítulo 2, apresentamos uma revisão dos principais conceitos relacionados a processos estocásticos, que servirão de base para as discussões ao longo do trabalho. Nos capítulos seguintes, investigamos diferentes configurações do problema de busca a um alvo único em meios heterogêneos. No Capítulo 3, consideramos um domínio semi-infinito; no Capítulo 4, introduzimos uma barreira refletora que limita o espaço de busca; e, no Capítulo 5, incorporamos um mecanismo de reposicionamento estocástico ao sistema limitado. No Capítulo 6, abordamos o problema do tamanho crítico do habitat para uma população de espécie única, cuja posição dos indivíduos obedece a uma dinâmica difusiva sujeita a reposicionamentos estocásticos. Por fim, apresentamos as considerações e perspectivas da tese. Cada capítulo conta com material suplementar reunido nos apêndices.

Os resultados de cada capítulo podem ser encontrados nas seguintes publicações

– **Capítulo 3:**

- M.A.F. dos Santos, L. Menon, and C. Anteneodo, “[Efficiency of random search with space-dependent diffusivity](#)”, *Physical Review E*, vol. 106, p. 044113, 2022.

– **Capítulo 4:**

- L. Menon, M.A.F. dos Santos, and C. Anteneodo, “[Random-search efficiency in a bounded interval with spatially heterogeneous diffusion coefficient](#)”, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2023, no. 12, p. 123203, 2023.

– **Capítulo 5:**

- L. Menon and C. Anteneodo, “[Random search with resetting in heterogeneous environments](#)”, *Physical Review E*, vol. 110, p. 054111, 2024.

– **Capítulo 6:**

- L. Menon, P. de Castro, and C. Anteneodo, “[Critical habitat size of organisms diffusing with stochastic resetting](#)”, *Physical Review E*, vol. 112, p. 014111, 2025.

2

Formulações e técnicas em processos estocásticos

Neste capítulo, apresentamos as formulações e técnicas fundamentais da teoria de processos estocásticos que serão utilizadas ao longo deste trabalho. O objetivo é tornar o texto autossuficiente, reunindo os elementos teóricos necessários para a compreensão dos resultados discutidos nos capítulos seguintes. A maioria dos conteúdos apresentados baseia-se em referências clássicas da área [5, 27, 60, 61] com algumas adaptações.

2.1

Variáveis aleatórias, distribuições e processos de Markov

Variáveis aleatórias: Uma variável aleatória é uma função que associa um valor numérico a cada possível resultado de um fenômeno probabilístico. O conjunto de todos os valores possíveis que esta variável pode assumir é chamado de conjunto de estados. Esse conjunto pode ser discreto, como no caso dos possíveis resultados de uma rolagem de dado, ou contínuo, como o tempo até o próximo decaimento radioativo de um certo elemento.

Em particular, consideramos uma variável aleatória contínua X , que assume valores $x \in \Omega$. A probabilidade de X assumir um valor no intervalo entre x e $x + dx$ é dada por $p(x) dx$, onde $p(x)$ é chamada de função densidade de probabilidade (PDF), ou simplesmente distribuição de probabilidade.

A função $p(x)$ deve satisfazer duas propriedades fundamentais: ser não-negativa, ou seja, $p(x) \geq 0$ para todo $x \in \Omega$, e ser normalizada, de modo que $\int_{\Omega} p(x) dx = 1$.

Momentos e função característica:

O n -ésimo momento de uma distribuição de probabilidade é definido como

$$\langle x^n \rangle = \int_{\Omega} x^n p(x) dx, \quad (2-1)$$

sendo que o valor esperado, ou valor médio, de uma variável aleatória é simplesmente o primeiro momento

$$\mu = \langle x \rangle. \quad (2-2)$$

A partir do valor médio, torna-se possível definir os momentos centrados, ou seja,

$$\langle (x - \mu)^n \rangle = \int_{\Omega} (x - \mu)^n p(x) dx. \quad (2-3)$$

Um exemplo é o momento centrado de ordem $n = 2$, chamado de variância da distribuição:

$$\text{Var}(x) \equiv \sigma^2(x) = \langle (x - \mu)^2 \rangle, \quad (2-4)$$

que mede a dispersão em torno do valor médio. A quantidade $\sigma(x)$ é chamada de desvio padrão.

A função característica de uma variável aleatória é a transformada de Fourier de sua PDF

$$\varphi(k) = \langle e^{ikx} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} p(x) dx. \quad (2-5)$$

A função característica é uma função geradora dos momentos, uma vez que sua expansão em série está associada aos momentos da PDF, isto é,

$$\varphi(k) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} \langle x^n \rangle. \quad (2-6)$$

Uma vez conhecida a forma da função geradora, é possível extrair qualquer momento de ordem n por meio da expressão

$$\langle x^n \rangle = (-i)^n \left. \frac{d^n \varphi(k)}{dk^n} \right|_{k=0}. \quad (2-7)$$

Na maioria dos casos, conhecendo os momentos da distribuição, é possível determinar a função característica, cuja transformada inversa resulta na própria PDF.

Processos estocásticos: Até agora falamos de variáveis aleatórias em um instante fixo. Para descrever fenômenos que mudam aleatoriamente no tempo, usamos processos estocásticos, que generalizam as variáveis aleatórias incluindo sua evolução temporal. Uma forma simples de definir um processo estocástico é como uma função de duas variáveis: o tempo e uma variável aleatória. Para cada instante de tempo, essa função assume um valor diferente, dependendo do resultado da variável aleatória [27]. Ou seja, nos tempos $t_n, t_{n-1}, t_{n-2}, \dots, t_0$, observamos os valores $x_n, x_{n-1}, x_{n-2}, \dots, x_0$ de uma variável aleatória $X(t)$. Dizemos também que, para esse processo, existe uma distribuição de probabilidades conjunta

$$p(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}; x_{n-2}, t_{n-2}; \dots, x_0, t_0) \quad (2-8)$$

que descreve completamente o sistema [5]. Também podemos assumir, para este processo, uma distribuição condicional

$$p(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_0, t_0) = \frac{p(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_0, t_0)}{p(x_{n-1}, t_{n-1}; x_{n-2}, t_{n-2}; \dots; x_0, t_0)}. \quad (2-9)$$

A Eq. (2-9) representa a distribuição de probabilidade condicional de o sistema estar no estado x_n no tempo t_n , dado que passou pelos estados x_0, x_1, \dots, x_{n-1} nos respectivos tempos t_0, t_1, \dots, t_{n-1} , assumindo o ordenamento temporal $t_n \geq t_{n-1} \geq \dots \geq t_0$. Note que, ao considerarmos a probabilidade condicional da Eq. (2-9) a determinação da probabilidade de x_n em t_n depende do conhecimento dos $n-1$ eventos anteriores, ou seja, toda história do processo.

Uma classe importante de processos em que isso não ocorre são os processos de Markov.

Processo de Markov: Um processo é dito de Markov quando a probabilidade de o sistema estar em um estado futuro depende apenas do estado atual, e não da trajetória passada. Em outros termos

$$p(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_0, t_0) = p(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}). \quad (2-10)$$

A aplicação sucessiva das equações (2-10) e (2-9) leva à seguinte propriedade fundamental dos processos de Markov

$$p(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}; x_{n-2}, t_{n-2}; \dots, x_0, t_0) = p(x_0, t_0) \prod_{k=1}^n p(x_k, t_k | x_{k-1}, t_{k-1}), \quad (2-11)$$

ou seja, a distribuição conjunta é dada pelo produto entre a distribuição inicial e as distribuições condicionais entre estados consecutivos. Essa expressão representa a condição inicial multiplicada pelo produto das probabilidades de transições sucessivas entre os estados.

Relações de Chapman-Kolmogorov: Considere a distribuição marginal definida como

$$p(x_2, t_2) = \int_{\Omega} dx_0 p(x_2, t_2; x_0, t_0), \quad (2-12)$$

onde a integração é realizada sobre todos os estados possíveis em x_0 . Supondo que o processo seja markoviano, podemos utilizar a propriedade expressa na Eq. (2-10) para reescrever a distribuição marginal como

$$p(x_2, t_2) = \int_{\Omega} dx_0 p(x_2, t_2 | x_0, t_0) p(x_0, t_0). \quad (2-13)$$

Podemos ainda introduzir um estado intermediário x_1 no tempo t_1 , com $t_0 < t_1 < t_2$, e considerar a seguinte decomposição da distribuição conjunta

$$\begin{aligned} p(x_2, t_2; x_0, t_0) &= \int_{\Omega} dx_1 p(x_2, t_2; x_1, t_1; x_0, t_0) \\ &= \int_{\Omega} dx_1 p(x_2, t_2 | x_1, t_1) p(x_1, t_1 | x_0, t_0) p(x_0, t_0). \end{aligned} \quad (2-14)$$

Note que, no lado direito da Eq. (2-14), o termo $p(x_0, t_0)$ não depende de x_1 e, portanto, não participa da integração. Podemos então dividir ambos os lados da equação por $p(x_0, t_0)$ e identificar, no lado esquerdo, a definição da distribuição condicional. Com isso, obtemos:

$$p(x_2, t_2 | x_0, t_0) = \int_{\Omega} dx_1 p(x_2, t_2 | x_1, t_1) p(x_1, t_1 | x_0, t_0). \quad (2-15)$$

Essa equação expressa a chamada propriedade de composição dos processos de Markov. Ou seja, a probabilidade de transição entre dois estados pode ser escrita como uma soma (ou integral) sobre todas as possíveis trajetórias intermediárias. Essa é conhecida relação de Chapman-Kolmogorov (CK),

essencial para derivar resultados provenientes de processos Markovianos.

2.2

Equação de Langevin

A equação de Langevin surge como uma descrição mecânica do movimento Browniano [4, 62], ao considerar uma partícula imersa em um meio viscoso. Para que essa descrição, em tempos longos, esteja de acordo com as previsões da mecânica estatística de equilíbrio, é necessário adicionar um termo de ruído à equação determinística. Este termo representa as flutuações aleatórias causadas pelas colisões com as moléculas do fluido [63]. A equação de Langevin é, portanto, uma equação diferencial estocástica (EDE). Uma EDE, ou uma equação de Langevin em sua forma geral, pode ser escrita como

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t) + g(x, t) \eta(t), \quad (2-16)$$

em que $\eta(t)$ representa um ruído branco gaussiano, caracterizado pelas propriedades

$$\langle \eta(t) \rangle = 0, \quad (2-17)$$

$$\langle \eta(t) \eta(t') \rangle = \delta(t - t'), \quad (2-18)$$

isto é, o ruído possui valor médio nulo e é delta-correlacionado no tempo, com variância unitária. O termo $f(x, t)$ representa uma força determinística (ou termo de arrasto), enquanto $g(x, t)$ controla a intensidade com que o ruído $\eta(t)$ afeta a variável dinâmica $x(t)$. Quando $g(x, t)$ é constante, dizemos que o ruído é aditivo. Quando $g(x, t)$ depende de $x(t)$, o ruído é chamado de multiplicativo. Esse termo está diretamente relacionado ao coeficiente de difusão, por exemplo, na forma $g(x, t) = \sqrt{2D}$, onde D é a difusividade do meio. As trajetórias podem ser obtidas a partir da integração da Eq. (2-16), isto é

$$x(t) - x(0) = \int_0^t f[x(s), s] ds + \int_0^t g[x(s), s] \eta(s) ds, \quad (2-19)$$

em que o primeiro termo do lado direito é uma integração convencional (do tipo Riemann), enquanto o segundo é uma integração estocástica. A integral estocástica requer um tratamento especial que é devido à natureza do ruído branco gaussiano $\eta(t)$, que apresenta flutuações abruptas e não é diferenciável em nenhum ponto. Tal tratamento será discutido na seção seguinte.

2.2.1

Integração estocástica

A integral presente no segundo termo do lado direito da Eq. (2-19) pode ser reescrita como

$$\int_0^t G(s) dW(s), \quad (2-20)$$

em que $dW(s)$ é o incremento do processo de Wiener. Essa interpretação surge ao associar o ruído branco gaussiano $\eta(t)$ aos incrementos do processo de Wiener de forma que [5]

$$dW(t) \equiv \eta(t) dt, \quad (2-21)$$

de modo que a expressão original $\int_0^t G(s)\eta(s)ds$ seja definida como $\int_0^t G(s)dW(s)$.

O intervalo de integração $[0, t]$ pode ser subdividido em n subintervalos

$$0 \leq t_1 \leq t_2 \leq t_3 \leq \dots \leq t_n, \quad (2-22)$$

e os pontos intermediários de cada subintervalo podem ser parametrizados como

$$\tau_i = (1 - \frac{A}{2})t_i + \frac{A}{2}t_{i-1}. \quad (2-23)$$

Assim, a integral da Eq. (2-20) pode ser definida como o limite de uma soma, ou seja

$$\int_0^t G(s) dW(s) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n G(\tau_i) [W(t_i) - W(t_{i-1})]. \quad (2-24)$$

Como o processo W não é diferenciável e possui variações abruptas, é fundamental especificar qual ponto intermediário τ_i está sendo utilizado na soma, já que diferentes escolhas resultam em diferentes resultados. Estas são chamadas de interpretações da integral estocástica para o ruído multiplicativo associado. Algumas destas interpretações recebem nomes específicos. Por exemplo, ao escolher $A = 2$, temos $\tau_i = t_{i-1}$, e a soma parcial assume a forma

$$S_n = \sum_{i=1}^n G[x(t_{i-1}), t_{i-1}] \Delta W_i, \quad (2-25)$$

que, no limite $n \rightarrow \infty$, corresponde à integral da Eq. (2-20) sob a interpretação de Itô, também chamada de integral de Itô. Por outro lado, se $A = 1$, então $\tau_i = \frac{1}{2}(t_i + t_{i-1})$, e temos:

$$S_n = \sum_{i=1}^n G\left[\frac{x(t_i) + x(t_{i-1})}{2}, t_{i-1}\right] \Delta W_i, \quad (2-26)$$

que corresponde à interpretação de Stratonovich da integral da Eq. (2-20). Outra escolha comum é o caso em que $A = 0$, que se refere a $\tau_i = t_i$, a interpretação para essa escolha recebe o nome de Hänggi-Klimontovich ou anti-Itô.

Podemos unificar essas diferentes interpretações em uma única expressão parametrizada pelo parâmetro A , ou seja

$$S_A \int_0^t G[x(s), s] dW(s) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n G\left[\left(1 - \frac{A}{2}\right)x(t_i) + \frac{A}{2}x(t_{i-1}), t_{i-1}\right] \Delta W_i. \quad (2-27)$$

O termo S_A à frente da integral indica que estamos adotando a chamada interpretação de Stratonovich generalizada, que envolve pontos intermediários

diferentes do ponto médio, definidos por uma prescrição parametrizada por A . Em geral, na literatura, a notação sem o S é usada para indicar que a integral deve ser interpretada no sentido de Itô, enquanto a presença do S indica uma prescrição do tipo Stratonovich. Nesta tese, adotamos essa notação pois estamos interessados em derivar resultados generalizados que sejam válidos independentemente da escolha da prescrição adotada para essa integral.

2.2.2

Equivalência entre interpretações

Independentemente da prescrição escolhida para a integral estocástica, é sempre possível reescrever uma equação diferencial estocástica (EDE) equivalente em outra convenção. Por exemplo, é possível encontrar uma EDE escrita na interpretação de Itô que é equivalente, em termos de solução, a uma EDE na interpretação de Stratonovich, e vice-versa. Em geral, para qualquer prescrição, pode-se encontrar uma forma equivalente em outra, desde que se ajustem adequadamente os coeficientes da equação estocástica. Aqui mostraremos o caso particular que mapeia todas as interpretações possíveis na forma de Itô. Para isto iniciamos com a soma da integral generalizada

$$S_A \int_0^t g[x(s), s] dW(s) \approx \sum_{i=1}^n g \left[\left(1 - \frac{A}{2}\right) x(t_i) + \frac{A}{2} x(t_{i-1}), t_{i-1} \right] \Delta W_i, \quad (2-28)$$

para pequenos Δt_i , podemos aproximar $x(t_i) \approx x(t_{i-1}) + dx(t_{i-1})$, então, a soma da Eq. (2-28) é reescrita

$$S_A \int_0^t g[x(s), s] dW(s) \approx \sum_{i=1}^n g \left[x(t_{i-1}) + \left(1 - \frac{A}{2}\right) dx(t_{i-1}) \right] \Delta W_i \quad (2-29)$$

Note que denotamos $g[x(t)] \equiv g[x(t), t]$ por questões de espaço no texto. Utilizando a formula de Itô, veja no apêndice A.1, para expandir a função g presente no somatório da Eq. (2-29)

$$\begin{aligned} S_A \int_0^t g[x(s), s] dW(s) &\approx \sum_{i=1}^n g[x(t_{i-1})] \Delta W_i \\ &+ \left(1 - \frac{A}{2}\right) \sum_{i=1}^n g'[x(t_{i-1})] g[x(t_{i-1})] \Delta t_i, \end{aligned} \quad (2-30)$$

tomando o limite do número de termos da soma indo para o infinito podemos escrever

$$S_A \int_0^t g[x(s), s] dW(s) = S_2 \int_0^t g[x(s), s] dW(s) + \left(1 - \frac{A}{2}\right) \int_0^t g'[x(s), s] g[x(s), s] ds. \quad (2-31)$$

Essa expressão mostra que qualquer integral estocástica com prescrição A pode ser reescrita na forma de Itô ($A = 2$). Note que tomando $A = 2$ a Eq. (2-31)

se verifica. Tendo isso em mãos podemos reescrever a Eq. (2-19) na forma diferencial¹

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t) + \left(1 - \frac{A}{2}\right) g'(x, t)g(x, t) + g(x, t)\eta(t), \quad (2-32)$$

Em resumo, a EDE presente na Eq. (2-32) é a forma de escrever qualquer outra EDE em termo de uma EDE na convenção de Itô, com um acréscimo de um termo de força. Este termo é comumente chamado de termo de deriva espúrio [27].

Na maioria de nossas análises consideramos o caso de puramente difusivo, ou seja, $f = 0$, e $g(x) = \sqrt{2D(x)}$. Neste caso, a equação de Langevin correspondente é

$$\frac{dx}{dt} = \left(1 - \frac{A}{2}\right) \frac{dD(x)}{dx} + \sqrt{2D(x)}\eta(t), \quad (2-33)$$

onde a equação está escrita na convenção de Itô. Ressalta-se, entretanto, que a formulação original parte da prescrição generalizada de Stratonovich, incorporando o parâmetro A , o qual permite analisar a dinâmica sob diferentes interpretações estocásticas.

2.3

Equação de Fokker-Planck

A equação que descreve a evolução da densidade de probabilidade de uma variável aleatória sujeita a uma força determinística e a flutuações estocásticas é uma equação diferencial parcial nas variáveis espaciais e temporal. Essa equação é conhecida como Equação de Fokker-Planck (EFP). A formulação baseada na EFP é equivalente à formulação por equações diferenciais estocásticas (EDEs), mas fornece diretamente a evolução da densidade de probabilidade do sistema.

Aqui apresentamos uma das formas de derivação da EFP; outras abordagens podem ser encontradas na Ref. [60]. Mostraremos uma derivação concisa baseada na relação de CK. Iniciamos com a definição do valor esperado de uma função genérica $h(x)$ em um tempo $t + \Delta t$, ou seja,

$$\langle h \rangle_{t+\Delta t} = \int dx' h(x') p(x', t + \Delta t), \quad (2-34)$$

e invocamos a relação de CK,

$$p(x', t + \Delta t) = \int dx p(x', t + \Delta t | x, t) p(x, t). \quad (2-35)$$

Combinando a Eq. (2-34) com a Eq. (2-35), obtemos

$$\langle h \rangle_{t+\Delta t} = \int dx' h(x') \left[\int dx p(x', t + \Delta t | x, t) p(x, t) \right]. \quad (2-36)$$

Reforçando que x' representa um pequeno incremento Δx sobre a variável x , ou seja, $x' = x + \Delta x$, aplicamos essa mudança na Eq. (2-36) e expandimos até

¹A partir daqui o termo $g(x, t)\eta(t)$ será integrado utilizando a convenção de Itô.

a segunda ordem em torno de $\Delta x = 0$, resultando em

$$\begin{aligned} \langle h \rangle_{t+\Delta t} = \int d\Delta x \int dx \left[h(x) + \Delta x h'(x) + \frac{1}{2} \Delta x^2 h''(x) + \dots \right] \\ \times p(x + \Delta x, t + \Delta t | x, t) p(x, t). \end{aligned} \quad (2-37)$$

Sendo $\langle \bullet \rangle \equiv \int d\Delta x \bullet p(x + \Delta x | x, t)$, considerando o valor médio do incremento, escrevemos

$$\langle \Delta x \rangle = D^{(1)}(x, t) \Delta t, \quad (2-38)$$

onde $D^{(1)}$ é o coeficiente de deriva, que pode depender explicitamente de x e t . De forma análoga, para o valor médio do quadrado do incremento, temos

$$\langle \Delta x^2 \rangle = 2D^{(2)}(x, t) \Delta t, \quad (2-39)$$

onde $D^{(2)}$ é o coeficiente de difusão. Assim, reescrevemos a Eq. (2-37) da seguinte forma

$$\langle h \rangle_{t+\Delta t} = \int dx \left[h(x) + D^{(1)}(x, t) \Delta t h'(x) + D^{(2)}(x, t) \Delta t h''(x) \right] p(x, t). \quad (2-40)$$

Aplicando integração por partes, obtemos

$$\frac{d\langle h \rangle}{dt} = \int dx h(x) \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[-D^{(1)}(x, t) p(x, t) \right] + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[D^{(2)}(x, t) p(x, t) \right] \right\}. \quad (2-41)$$

Por outro lado, podemos derivar diretamente o valor esperado de h em função do tempo

$$\frac{d\langle h \rangle}{dt} = \int dx h(x) \frac{\partial p(x, t)}{\partial t}. \quad (2-42)$$

Combinando as Eq. (2-41) e Eq. (2-42), obtemos finalmente

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ -D^{(1)}(x, t) p(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} \left[D^{(2)}(x, t) p(x, t) \right] \right\}, \quad (2-43)$$

que é a conhecida equação de Fokker-Planck.

A densidade de probabilidade $p(x, t)$ pode ser expressa em termos da probabilidade de transição como $p(x, t) = \int dx_0 p(x, t | x_0, t_0) p(x_0, t_0)$, onde $p(x, t | x_0, t_0)$ representa a probabilidade de transição de uma posição x_0 no tempo t_0 para a posição x no tempo t . Essa função também é conhecida como propagador. Uma característica importante é que o propagador $p(x, t | x_0, t_0)$ também satisfaz a mesma equação de Fokker-Planck em relação às variáveis x e t . Neste caso x_0 e t_0 são fixos.

2.3.1

Equação de Fokker-Planck retrógrada

A equação derivada na seção anterior descreve como a densidade de probabilidade evolui ao longo do tempo a partir de uma condição inicial fixa. No entanto, em muitas situações, estamos interessados em saber, dado um estado final em x no tempo t , qual é a probabilidade de o sistema ter vindo

de um estado anterior em x_0 no tempo t_0 . Ou seja, o estado final x e o tempo final t são fixos e as variáveis são x_0 e t_0 . De forma análoga a EFP anterior podemos fazer uma derivação para esta situação.

O ponto de partida, mais uma vez, é a relação de CK

$$p(x, t | x_0, t_0 - \Delta t_0) = \int dx' p(x, t | x', t_0) p(x', t_0 | x_0, t_0 - \Delta t_0), \quad (2-44)$$

ou seja, estamos interessados na probabilidade de transição do ponto x_0 no tempo $t_0 - \Delta t_0$ até o ponto x no tempo t . Para isso, escrevemos essa probabilidade como o produto da probabilidade de ir de x_0 em $t_0 - \Delta t_0$ até um ponto intermediário x' em t_0 , e depois de x' em t_0 até x em t , integrando sobre todos os possíveis estados intermediários x' . Podemos assumir que x' é x_0 mais um pequeno incremento, $x' = x_0 + \Delta x_0$. Aplicando isso e expandindo em torno de $\Delta x_0 = 0$, obtemos

$$p(x, t | x_0, t_0 - \Delta t_0) \approx \int d\Delta x_0 [p(x, t, |x_0, t_0) + \Delta x_0 \partial_{x_0} p(x, t | x_0, t_0) + \frac{\Delta x_0^2}{2} \partial_{x_0}^2 p(x, t | x_0, t_0)] \times p(x_0 + \Delta x_0, t_0 | x_0, t_0 - \Delta t_0), \quad (2-45)$$

como consequência

$$p(x, t | x_0, t_0 - \Delta t_0) = p(x, t | x_0, t_0) + \langle \Delta x_0 \rangle_{t_0 - \Delta t_0} \partial_{x_0} p(x, t | x_0, t_0) + \frac{1}{2} \langle \Delta x_0^2 \rangle_{t_0 - \Delta t_0} \partial_{x_0}^2 p(x, t | x_0, t_0). \quad (2-46)$$

Utilizando a expressão para os valores médios do incremento da posição e do incremento ao quadrado, respectivamente as Eq. (2-38) e Eq. (2-39), e tomando o limite de $\Delta t_0 \rightarrow 0$ aplicando na Eq. (2-46), obtemos

$$-\frac{\partial}{\partial t_0} p(x, t | x_0, t_0) = D^{(1)}(x_0, t_0) \frac{\partial}{\partial x_0} p(x, t | x_0, t_0) + D^{(2)}(x_0, t_0) \frac{\partial^2}{\partial x_0^2} p(x, t | x_0, t_0). \quad (2-47)$$

Podemos fazer uma mudança de variável, considerando o tempo transcorrido entre t_0 e t , isto é, $\tau = t - t_0$. Neste caso o termo da derivada se transforma conforme $\frac{\partial}{\partial t_0} \Rightarrow -\frac{\partial}{\partial \tau}$, e também adotamos a notação $p(x, \tau | x_0)$. Para um tempo inicial $t_0 = 0$ e variável τ se torna t .

2.3.2

De Langevin para Fokker-Planck

Para mostrar a relação entre as trajetórias obtidas pela EDE de Langevin e as distribuições de probabilidades que obedecem a EFP, iniciamos com um caso geral onde o termo de arraste e o coeficiente de difusão ambos dependem da posição e do tempo

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t) + (1 - \frac{A}{2})\partial_x D(x, t) + \sqrt{2D(x, t)}\eta(t). \quad (2-48)$$

Efetuamos um passo de integração de um tempo t até um tempo $t + \Delta t$

$$\underbrace{x(t + \Delta t) - x(t)}_{\Delta x} = \left[f(x, t) + (1 - \frac{A}{2})\partial_x D(x, t) \right] \Delta t + \sqrt{2D(x, t)} \int_t^{t+\Delta t} ds \eta(s). \quad (2-49)$$

Estamos considerando que o termo que acompanha o ruído sempre é integrado na interpretação de Itô, assim tomando o valor médio obtemos

$$\langle \Delta x \rangle = [f(x, t) + (1 - \frac{A}{2})D'(x, t)]\Delta t. \quad (2-50)$$

Comparando com a Eq. (2-38), identificamos $D^{(1)} = f(x, t) + (1 - \frac{A}{2})D'(x, t)$. O termo Δx^2 se reduz a $\Delta x^2 = 2D(x)(\int ds \eta(s))^2$, cujo valor médio vale

$$\langle \Delta x^2 \rangle = 2D(x, t)\Delta t, \quad (2-51)$$

como consequência $D^{(2)}(x, t) = D(x, t)$. Assim reescrevemos a EFP, Eq. (2-43), com os novos coeficientes, obtendo

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ -[f(x, t) + (1 - \frac{A}{2})D'(x, t)]p(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} [D(x, t)p(x, t)] \right\}. \quad (2-52)$$

Nesta tese focamos no caso em que o processo associado às buscas aleatórias é puramente difusivo, ou seja, $f(x, t) = 0$. Também, o coeficiente de difusão depende explicitamente apenas da posição. Neste panorama reescrevemos a Eq. (2-52) como segue

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ D(x)^{1-\frac{A}{2}} \frac{\partial}{\partial x} [D(x)^{\frac{A}{2}} p(x, t)] \right\}, \quad (2-53)$$

em que, para $D(x)$ constante, se reduz à equação de difusão homogênea e a dependência do parâmetro A que controla a interpretação estocástica para o ruído multiplicativo desaparece.

Para o mesmo caso de arraste nulo e coeficiente de difusão dependente apenas da posição escrevemos a EFP retrógrada

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x, t|x_0) = D(x_0)^{\frac{A}{2}} \frac{\partial}{\partial x_0} \left\{ D(x_0)^{1-\frac{A}{2}} \frac{\partial}{\partial x_0} p(x, t|x_0) \right\}, \quad (2-54)$$

forma que será utilizada de forma recorrente no decorrer da tese.

2.4

Transformação de Lamperti

Nesta seção, definimos uma transformação que permite mapear um problema com difusão dependente do estado em outro com difusão constante. Essa transformação, conhecida como transformação de Lamperti [64–66] pode ser aplicada tanto nas EDE [67] quanto diretamente na EFP [25], e tem a forma de

$$y(x) = \int_0^x \frac{dx'}{\sqrt{D(x')}}. \quad (2-55)$$

Nosso foco está na Eq. (2-33), que pode ser reescrita como

$$dx = (1 - \frac{A}{2})D'(x)dt + \sqrt{2D(x)}dW, \quad (2-56)$$

onde o coeficiente de difusão depende apenas da posição x . Ao aplicar a transformação definida na Eq. (2-55) na EDE da Eq. (2-56) utilizando a formula de Itô (Apêndice A.1), obtemos

$$dy(x) = \frac{1-A}{2\sqrt{D(x)}}D'(x)dt + \sqrt{2}dW. \quad (2-57)$$

Com esta transformação, a Eq. (2-57) na variável y passa a ter um coeficiente de difusão constante igual a unidade, com a devida modificação no termo de arraste.

A transformação da Eq. (2-55) pode ser aplicada diretamente na EFP, resultando em

$$\frac{\partial p(y,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial y} \left\{ \frac{1-A}{2\sqrt{D(x)}}D'(x)p(y,t) \right\} + \frac{\partial^2 p(y,t)}{\partial y^2}, \quad (2-58)$$

que é equivalente a considerar a EFP associada a EDE em y na Eq. (2-56).

Note que, para a transformação da Eq. (2-55) ser bem definida, é necessário que o integrando não cresça mais rápido que x^2 na origem. Nesse caso, y é uma função monotonicamente crescente de x . A integral $y(x)$ desempenhará um papel central, pois contém a informação sobre o perfil $D(x)$.

2.5

Processos de primeira passagem

Um processo de primeira passagem é definido através de uma quantidade chamada probabilidade de primeira passagem, que é a probabilidade de um processo estocástico atingir um determinado estado em um determinado tempo pela primeira vez [11]. Um dos papéis mais importantes desse tipo de processo é que muitos fenômenos são desencadeados após um evento de primeira passagem. Outras aplicações clássicas são os problemas de saída de uma certa região, como o escape de uma partícula Browniana de um potencial meta-estável [60]. A questão central em problemas de primeira passagem é determinar a distribuição dos tempos de primeira passagem (DTPP). Para isso, começamos calculando a probabilidade de que um caminhante aleatório, cuja dinâmica obedece a um processo estocástico genérico, esteja entre x_a e x_b no instante t , dado que sua posição inicial está distribuída conforme uma densidade $\phi(x_0)$, ou seja, $p(x, t = 0 | x_0) = \phi(x_0)$. Essa probabilidade é definida como

$$Q(x_0, t) = \int_{x_a}^{x_b} dx p(x, t | x_0), \quad (2-59)$$

e é chamada de probabilidade de sobrevivência.

Como primeira suposição, assumimos que, no instante $t = 0$, todos

os valores iniciais x_0 estão contidos no intervalo $x_a \leq x \leq x_b$, de modo que $Q(x_0, t = 0) = 1$. Também queremos garantir que, uma vez que o caminhante saia do intervalo de interesse, ele não retorne mais. Para isso, impomos condições de contorno absorventes: $Q(x_a, t) = Q(x_b, t) = 0$. Ou seja, toda vez que um caminhante alcança uma das fronteiras, ele é removido do sistema.

Podemos calcular a probabilidade de que o caminhante deixe a região $x_a \leq x \leq x_b$ no intervalo de tempo entre t e $t + \Delta t$ a partir da diferença $Q(x_0, t) - Q(x_0, t + \Delta t)$. Também associamos a essa probabilidade de saída uma PDF, agora com a variável aleatória sendo o tempo, ou seja

$$Q(x_0, t) - Q(x_0, t + \Delta t) = \wp(t) \Delta t, \quad (2-60)$$

em que $\wp(t)$ é a DTPP, tomando o limite $\Delta t \rightarrow 0$, obtemos

$$\wp(t) = -\frac{d}{dt}Q(x_0, t). \quad (2-61)$$

Assim, $\wp(t)$ fornece a taxa de ocorrência da primeira saída do intervalo $[x_a, x_b]$ no instante t .

Note que a DTPP fornece a informação da fração de caminhantes que deixam a região por unidade de tempo através das fronteiras absorventes. Esta definição equivale à definição de fluxo difusivo. Portanto, podemos expressar $\wp(t)$ em termos dos fluxos nas fronteiras absorventes, de modo que

$$\wp(t) = j(x_a, t) + j(x_b, t), \quad (2-62)$$

onde $j(x, t)$ é o fluxo de probabilidade na posição x e no tempo t .

2.5.1

Momentos e função geratriz

A função geratriz para a DTPP é definida como

$$\langle e^{-st} \rangle = \int_0^\infty ds e^{-st} \wp(t) = 1 - s\langle t \rangle + \frac{s^2}{2!}\langle t^2 \rangle + \frac{s^3}{3!}\langle t^3 \rangle + \dots \quad (2-63)$$

ou seja, a transformada de Laplace da DTPP. Porém, como $\wp(t) = -dQ/dt$, extraímos a relação

$$\langle e^{-st} \rangle = \wp(\tilde{s}) = 1 - s\tilde{Q}(x_0, s), \quad (2-64)$$

então $\tilde{Q}(x_0, s) = \sum_{n=1}^\infty (-s)^{n-1} \langle t^n \rangle / n!$, o que nos permite definir todos os momentos a partir da probabilidade de sobrevivência no espaço auxiliar de Laplace, isto é,

$$\langle t^n \rangle = (-1)^{n-1} n \left. \frac{d^{n-1}}{ds^{n-1}} \tilde{Q}(x_0, s) \right|_{s=0}. \quad (2-65)$$

Em especial o tempo médio de primeira passagem é obtido simplesmente através da relação $\langle t \rangle = Q(x_0, s)|_{s=0}$.

2.6

Busca aleatória como um problema de primeira passagem

Um problema de busca aleatória pode ser reformulado como um problema de primeira passagem. Consideramos, então, uma situação unidimensional em que um caminhante aleatório parte de uma posição $x_0 \in [x_a, \infty]$, com o objetivo de alcançar um alvo localizado na posição $x = x_a$. O foco é determinar a distribuição dos tempos em que o caminhante alcança esse alvo. A dinâmica individual é governada pela equação de Langevin com coeficiente de difusão homogêneo $\dot{x} = \sqrt{D} \eta(t)$. A EFP associada a dinâmica individual é a equação de difusão

$$\partial_t p(x, t|x_0) = D \partial_x^2 p(x, t|x_0), \quad (2-66)$$

a condição inicial é $p(x, 0) = \delta(x - x_0)$, e o alvo é modelado a partir de uma condição de contorno absorvente $p(x_a, t) = 0$, ou seja, quando o caminhante encontra o alvo ele é removido do sistema. A solução para Eq. (2-66) sob estas condições torna-se [68]

$$p(x, t|x_0) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \left(e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4Dt}} - e^{-\frac{(x-2x_a+x_0)^2}{4Dt}} \right). \quad (2-67)$$

A partir da Eq. (2-67) podemos obter a probabilidade sobrevivência, definida a partir da Eq. (2-59), resultando em

$$Q(x_0, t) = \text{erf} \left(\frac{x_0 - x_a}{\sqrt{4Dt}} \right), \quad (2-68)$$

este resultado é utilizado para o cálculo da DTPP, definida na Eq. (2-61), que tem a forma de

$$\wp(t) = \frac{x_0 - x_a}{\sqrt{4\pi D} t^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{(x_0 - x_a)^2}{4Dt}}. \quad (2-69)$$

Essa mesma expressão para a DTPP pode ser obtida analisando o fluxo de probabilidade na posição do alvo, ou seja,

$$\wp(t) = j(x, t)|_{x_a} = -D \frac{\partial}{\partial x} p(x, t|x_0) \Big|_{x_a} \quad (2-70)$$

Para estudar os momentos da distribuição da Eq. (2-69), vamos calcular o momento de ordem $q \in \mathbb{R}$. Se $q \geq 1/2$, a integral de $t^q \wp(t)$ diverge, caso contrário, ou seja se $q < 1/2$, temos

$$\langle t^q \rangle = \frac{\Gamma(\frac{1}{2} - q)}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{(x_0 - x_a)^2}{4D} \right)^q. \quad (2-71)$$

Isso mostra que, em particular, o valor médio do TPP diverge, tornando-se inadequado para descrever o desempenho da busca.

Alternativamente, podemos usar um outro momento que se mantém finito, a média do inverso dos tempos de primeira passagem, definida como

$$\left\langle \frac{1}{t} \right\rangle = \int_0^\infty dt t^{-1} \wp(t) = \int_0^\infty ds \tilde{\wp}(s). \quad (2-72)$$

Esta média é a denominada eficiência [69]

$$\mathcal{E} \equiv \left\langle \frac{1}{t} \right\rangle, \quad (2-73)$$

que fornece a informação de quão rápido o caminhante encontra o alvo. esta quantidade privilegia a contribuição dos tempos de chegada curtos, desconsiderando trajetórias que levam tempos muito longos para alcançar o alvo.

É importante destacar que existem diferentes formas de definir a eficiência de busca. Uma das mais comuns é a razão entre o número de alvos encontrados e a distância percorrida pelo caminhante [16]. No entanto, neste trabalho adotamos a definição da Eq. (2-73), em que a eficiência é dada pela média do inverso do tempo de encontro. Essa escolha equivale a considerar a razão entre o número de alvos visitados e o tempo gasto para encontrá-los. Como aqui estamos interessados em buscas de um único alvo, essa definição se reduz simplesmente a $1/t$. Adicionalmente, pode-se interpretar $\langle 1/t \rangle$ como a frequência média de encontros. Esta quantidade tem sido utilizada em uma série de trabalhos para caracterizar o desempenho de buscas, incluindo buscas sob influências de forças externas [70], baseadas em voos de Lévy [71,72], entre outros exemplos [73,74].

Para o caso da DTPP da Eq. (2-69) a eficiência de busca tem a forma de [71]

$$\mathcal{E} = \frac{2D}{(x_0 - x_a)^2}, \quad (2-74)$$

definindo $L = x_0 - x_a$ como a distância entre a posição inicial e o alvo, vemos que a eficiência é simplesmente o inverso do tempo característico para que uma partícula se difunda por uma distancia L .

2.7

Métodos computacionais

2.7.1

Método de Euler para EDE

Computacionalmente o nosso objetivo é gerar trajetórias a partir da integração da seguinte EDE

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t) + g(x, t) \eta(t). \quad (2-75)$$

O método de Euler se baseia na expansão em primeira ordem de tempo da Eq. (2-75), ou seja

$$x_{i+1} = x_i + f(x_i, t_i) \Delta t + g(x_i, t_i) \sqrt{\Delta t} \eta_i, \quad (2-76)$$

sendo $\langle \eta_i \rangle = 0$ e $\langle \eta_i \eta_j \rangle = \delta_{ij}$. Note que $\sqrt{\Delta t} \eta_i$ representa o incremento de Wiener ΔW_i que possui valor médio zero e variância proporcional a Δt . Por esta razão, o termo estocástico da EDE discretizada acompanha o termo $\sqrt{\Delta t}$, o que garante a correta representação estatística do ruído.

2.7.2

Esquema numérico para a difusão

Para tratar de problemas com difusão dependente do espaço, utilizamos uma generalização do método FCTS (*Forward Time Centered Space*), conforme descrito em [75]. Antes de considerar o caso heterogêneo, analisamos a equação de difusão homogênea, $\partial_t p = D \partial_x^2 p$, como ponto de partida para a construção do método. A discretização no tempo e no espaço leva à seguinte equação

$$\frac{1}{\Delta t} (p_j^n - p_j^{n+1}) = \frac{D}{(\Delta x)^2} (p_{j+1}^n - 2p_j^n + p_{j-1}^n). \quad (2-77)$$

O domínio espacial $[0, L]$ é dividido uniformemente em N_x subintervalos de comprimento $\Delta x = \frac{L}{N_x}$. Os pontos de grade são definidos por $x_i = i \Delta x$, com $i = 0, 1, \dots, N_x$. O tempo é discretizado em passos de tamanho Δt , e o número total de passos é dado por $N_t = \lfloor T_{\max}/\Delta t \rfloor$, onde T_{\max} representa o tempo final da simulação. A estabilidade da solução requer que o passo de tempo obedeça ao critério $\frac{2D\Delta t}{(\Delta x)^2} \leq 1$.

Para a equação de difusão heterogênea

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D^{1-\frac{A}{2}} \frac{\partial}{\partial x} [D^{\frac{A}{2}} p] \right),$$

definimos a variável auxiliar $u(x, t) = D(x)^{\frac{A}{2}} p(x, t)$, que na malha discretizada corresponde a $u_j = (D_j)^{\frac{A}{2}} p_j$. Observe que o termo

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(D^{1-\frac{A}{2}} \frac{\partial}{\partial x} u(x, t) \right), \quad (2-78)$$

representa a variação do fluxo entre as células j e $j+1$. Dessa forma, podemos expressar a discretização temporal da equação heterogênea de modo que

$$\frac{p_j^{n+1} - p_j^n}{\Delta t} = - \frac{J_{j+1/2}^n - J_{j-1/2}^n}{\Delta x}, \quad (2-79)$$

onde $J_{j+1/2}$ é o fluxo que sai da célula j e entra na célula $j+1$, sendo $x_{j+1/2}$ a posição da fronteira entre essas duas células. Sendo

$$J_{j+1/2}^n = -D_{j+1/2} \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{\Delta x}, \quad (2-80)$$

com $D_{j+1/2}^{1-A/2} = (D_j^{1-A/2} + D_{j+1}^{1-A/2})/2$. Heuristicamente podemos adotar o

critério

$$\Delta t \leq \min_j \left[\frac{(\Delta x)^2}{2D_{j+1/2} \Delta t} \right]; \quad (2-81)$$

para que a integração convirja [75]. Este esquema é válido para qualquer perfil de difusividade $D(x)$, inclusive aqueles que não são tratáveis analiticamente.

Podemos também, a partir das técnicas descritas até aqui, investigar a DTPP e os observáveis associados. Como a função densidade de probabilidade p_j^n é conhecida em todos os instantes de tempo, tanto a probabilidade de sobrevivência quanto a DTPP e seus momentos podem ser obtidos em forma discreta, por meio de operações numéricas diretas sobre p_j^n .

3

Busca aleatória em meios heterogêneos semi-infinitos

Neste capítulo, adentramos ao tema de buscas aleatórias em meios heterogêneos, com o objetivo de caracterizar o desempenho de buscas realizadas por um caminhante que procura por um alvo único em determinada posição. Abordamos casos unidimensionais em meios heterogêneos irrestritos, considerando diferentes formas de $D(x)$ e interpretações para integração estocástica associada ao PDH. Em todos os casos, sem perda de generalidade, consideramos o alvo localizado na origem. A metodologia adotada segue a mesma abordagem utilizada para buscas em ambientes homogêneos (Seção 2.6).

Iniciamos nosso estudo com o paradigmático perfil de difusividade em lei de potência, que nos permite derivar resultados válidos para qualquer interpretação associada ao PDH ($A \in [0, 2]$). Obtemos a DTPP que nos permitiu determinar a eficiência de busca.

Para perfis arbitrários de difusividade $D(x)$, nos mantendo na interpretação de Stratonovich ($A = 1$), obtemos resultados analíticos gerais. Para estes perfis arbitrários, resultados para interpretações diferentes da de Stratonovich são obtidos numericamente.

3.1

Busca aleatória em meios com difusividade do tipo potência sob diferentes interpretações

Como primeiro caso, adotamos um perfil do tipo lei de potência para representar a difusividade heterogênea

$$D(x) = D_0 x^\alpha, \quad (3-1)$$

com $x \geq 0$ e $\alpha < 2$. Esse perfil é de interesse, uma vez que pode descrever a difusão tanto em meios turbulentos [76] quanto em meios fractais [77]. Além disso, apresenta diversas características relevantes, úteis na investigação de questões fundamentais, incluindo a ergodicidade em processos estocásticos [25], estatísticas de valores extremos [78], classes de universalidade [79], além de induzir um comportamento difusivo anômalo.

Ilustramos, na Fig. 3.1, o comportamento de um caminhante aleatório em um processo de busca, sujeito à dinâmica de Langevin com um perfil de difusividade do tipo lei de potência. As trajetórias são obtidas por meio da integração da Eq. (2-33), para $\alpha = \pm 0,5$. O alvo está localizado em $x = 0$ e é modelado por uma fronteira absorvente. Consideramos três diferentes interpretações para integral estocástica, mediadas pelo parâmetro A . Em cada

interpretação, o termo estocástico é o mesmo — utilizamos a mesma sequência de ruído para fins de comparação — porém, o termo de arrasto¹ determinístico torna-se mais intenso à medida que o processo se torna mais antecipante (isto é, para menores valores de A). Além disso, o termo de arrasto é positivo para $\alpha > 0$ e negativo para $\alpha < 0$. Assim, ao considerarmos uma interpretação mais antecipante, o caminhante tende a atingir a origem pela primeira vez mais cedo ou mais tarde, respectivamente, como pode ser observado em cada painel da Fig. 3.1.

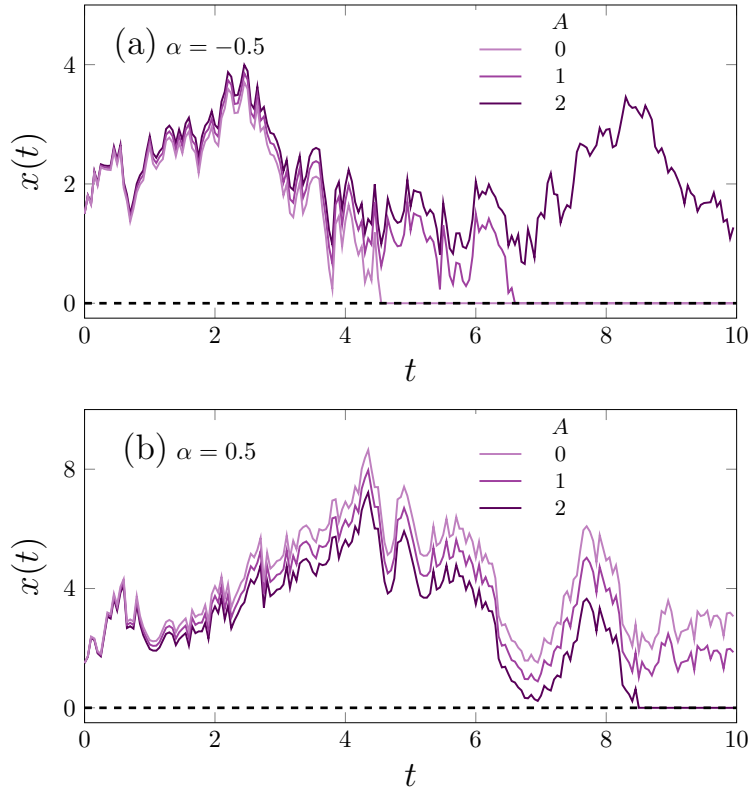


Figura 3.1: Trajetórias aleatórias com $D(x) = D_0 x^\alpha$ e uma fronteira absorvente em $x = 0$ (linha tracejada), para $\alpha = -0.5$ (a) e $\alpha = 0.5$ (b). Adotamos $D_0 = 1.0$, $x_0 = 1.5$, e a integração da Eq. (2-33) foi feita utilizando o método de Euler. Em cada painel, a mesma sequência aleatória foi usada, para fins de comparação.

3.1.1

Probabilidade de sobrevivência

Nosso objetivo é caracterizar as buscas aleatórias. Essa caracterização tem início com a obtenção da probabilidade de sobrevivência, a partir da qual derivamos as demais quantidades de interesse, que fornecem informações sobre o desempenho da busca. Para obtê-la partimos da EFP retrógrada (Eq. (2-54)) e aplicamos a definição de probabilidade de sobrevivência (Eq. (2-59)),

¹Arraste devido a equivalência das demais interpretações em uma EDE do tipo Itô.

resultando em

$$\frac{\partial}{\partial t}Q(x_0, t) = D(x_0)^{\frac{A}{2}} \frac{\partial}{\partial x_0} \left\{ D(x_0)^{1-\frac{A}{2}} \frac{\partial}{\partial x_0} Q(x_0, t) \right\}. \quad (3-2)$$

Aplicando a transformação de variáveis definida na Eq. (2-55), a Eq. (3-2) torna-se

$$\frac{\partial}{\partial t}Q(y_0, t) = \frac{1-A}{2\sqrt{D(x)}} \frac{dD(x)}{dx} \Big|_{y_0} \frac{\partial}{\partial y_0} Q(y_0, t) + \frac{\partial^2}{\partial y_0^2} Q(y_0, t). \quad (3-3)$$

No caso particular para o perfil de difusividades em lei de potência (Eq. (3-1)), nova variável y_0 ganha a forma de

$$y_0(x_0) = \frac{2 x_0^{1-\frac{\alpha}{2}}}{\sqrt{D_0}(2-\alpha)}. \quad (3-4)$$

Na expressão da Eq. (3-4) nota-se que o expoente associado a x_0 sempre é positivo enquanto $\alpha < 2$. Assim, sob essa condição, y_0 é sempre positivo no intervalo de interesse e satisfaz a propriedade de que, quando $x_0 \rightarrow 0$, então $y_0 \rightarrow 0$, e quando $x_0 \rightarrow \infty$, temos $y_0 \rightarrow \infty$. A partir daqui vamos usar a definição $y_0 \equiv y_0(x_0)$ para se referir a esta variável. Então, reescrevemos a Eq. (3-3) para este caso particular

$$\frac{\partial}{\partial t}Q(y_0, t) = \frac{\lambda}{y_0} \frac{\partial}{\partial y_0} Q(y_0, t) + \frac{\partial^2}{\partial y_0^2} Q(y_0, t), \quad (3-5)$$

com

$$\lambda = \frac{(1-A)\alpha}{2-\alpha}, \quad (3-6)$$

reforçamos que a condição de contorno é a de alvo absorvente $Q(0, t) = 0$. E, como condição inicial temos a condição de que todos os caminhantes ainda não encontraram o alvo, ou seja $Q(y_0 > 0, 0) = 1$, já que $p(y, 0|y_0) = \delta(y - y_0)$ e $y_0 \in (0, \infty)$. Para encontrar solução da Eq. (3-5), utilizamos a transformada de Laplace, definida no Apêndice A.2, o que resulta em

$$\tilde{Q}''(y_0, s) + \frac{\lambda}{y_0} \tilde{Q}'(y_0, s) - s\tilde{Q}(y_0, s) = -1 \quad (3-7)$$

essa equação admite solução analítica, conforme mostrado no Apêndice B.1, dada por

$$\tilde{Q}(y_0, s) = \frac{1}{s} \left[1 - \left(\frac{\sqrt{s} y_0}{2} \right)^b \times \frac{2K_b(\sqrt{s} y_0)}{\Gamma(b)} \right], \quad (3-8)$$

que na variável original x_0 se torna

$$\tilde{Q}(x_0, s) = \frac{1}{s} - \frac{2}{\Gamma[b]s} \left(\frac{x_0^{\frac{2-\alpha}{2}}}{2-\alpha} \sqrt{\frac{s}{D_0}} \right)^b \times K_b \left(\frac{2x_0^{\frac{2-\alpha}{2}}}{2-\alpha} \sqrt{\frac{s}{D_0}} \right),$$

em que $K_b(z)$ é a função de Bessel modificada e

$$b \equiv b(\alpha, A) = \frac{1-\alpha(1-A/2)}{2-\alpha}. \quad (3-9)$$

3.1.2

Distribuição de tempos de primeira passagem

A partir da Eq. (3-8), a transformada de Laplace da DTPP é dada por $\tilde{\wp}(s) = 1 - s\tilde{Q}(x_0, s)$, então

$$\tilde{\wp}(s) = \left(\frac{\sqrt{s} y_0}{2} \right)^b \frac{2}{\Gamma[b]} K_b(\sqrt{s} y_0). \quad (3-10)$$

Para realizar a inversão de Laplace, utilizamos $\mathcal{L}^{-1} \left\{ s^{\frac{b}{2}} K_b(d\sqrt{s}) \right\} = \exp(-d^2/[4t]) d^b / (2t)^{b+1}$ [80], o que implica

$$\wp(t) = \left(\frac{y_0}{2} \right)^{2b} \frac{e^{-\frac{y_0^2}{4t}}}{\Gamma(b) t^{1+b}}. \quad (3-11)$$

A condição $\alpha(1 - A/2) < 1$ deve ser satisfeita para que a DTPP seja normalizável. Esta normalização garante que todos os caminhantes encontrem o alvo.

A Figura (3.2) mostra a excelente correspondência entre a DTPP obtida pela previsão analítica dada pela Eq. (3-11) e pelas simulações da Eq. (2-33) com fronteira absorvente em $x = 0$, para diferentes valores de A . Por exemplo, no caso $\alpha = -0.5$ (a), nota-se que, para um caminhante com maior A , a probabilidade de tempos curtos diminui e as caudas são mais longas, duas características que contribuem para a tendência mostrada na Fig. 3.1, atrasando o encontro do caminhante com a parede absorvente. O oposto ocorre no caso $\alpha = 0.5$ (b), também em acordo com a Fig. 3.1

Além disso, podemos definir a seguinte variável adimensional

$$\xi = \frac{t}{\tau}, \quad (3-12)$$

onde

$$\tau = y_0^2/4. \quad (3-13)$$

O termo τ refere-se ao tempo característico para que o caminhante se difunda até atingir uma distância proporcional a y_0 . Note que τ não depende da interpretação adotada.

A partir deste tempo característico podemos encontrar uma forma de escala para a DTPP

$$\wp(t) = \frac{1}{\tau} \Phi\left(\frac{t}{\tau}\right), \quad (3-14)$$

em que a função de forma se torna

$$\Phi(\xi) = \frac{\xi^{-(b+1)}}{\Gamma(b)} e^{-\frac{1}{\xi}}. \quad (3-15)$$

A forma da distribuição na Eq. (3-14) evidencia que a DTPP depende apenas de uma única escala de tempo τ . No entanto, a função $\Phi(\xi)$ depende explicitamente de $b(\alpha, A)$, tanto na cauda da distribuição quanto na normalização.

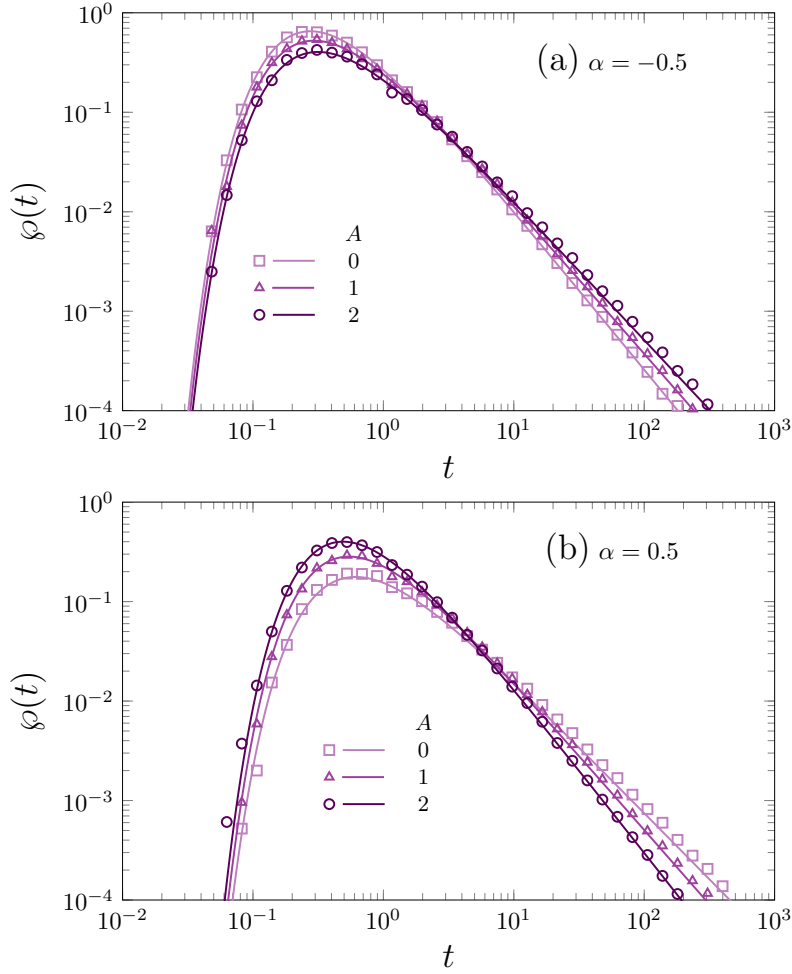


Figura 3.2: Distribuição do tempo de primeira passagem (DTPP) dada pela Eq. (3-11) (linhas contínuas) e a partir de 10^5 trajetórias obtidas da Eq. (2-33) com fronteira absorvente em $x = 0$ (símbolos), para o HDP com $D(x) = D_0 x^\alpha$. Os painéis (a) e (b) correspondem a $\alpha = -0.5$ e $\alpha = 0.5$, respectivamente. Em todos os casos $x_0 = 1.0$ e $D_0 = 1.0$. Nas simulações, para $t < 1$ foi usado $dt = 10^{-4}$, e para $t \geq 1$ foi usado $dt = 10^{-2}$.

Assim, embora a DTPP escalada não dependa diretamente de τ , ela ainda continua a refletir a influência do expoente α , associado ao perfil de difusividade, e da interpretação para a integral estocástica adotada. Um caso particular é quando consideramos a interpretação de Stratonovich $A = 1$. Neste caso a quantidade b se torna fixa para qualquer valor de α , ou seja

$$b(\alpha, 1) = \frac{1}{2}, \quad (3-16)$$

com isso a DTPP da Eq. (3-14) possui um comportamento escalável para qualquer α .

Também podemos realizar uma análise de regimes da DTPP com base no tempo característico τ . Para $t \ll \tau$, o comportamento dominante é superexponencial, evidenciando a baixa probabilidade de chegada imediata das partículas ao alvo. No regime intermediário, $t \sim \tau$, ocorre o pico da

distribuição, correspondendo ao tempo mais provável de chegada. Por outro lado, para $t \gg \tau$, a DTPP apresenta uma cauda do tipo lei de potência, indicando que uma fração dos caminhantes pode demorar significativamente mais que o tempo típico para atingir o alvo.

3.1.3

Desempenho de busca

Para caracterizar o desempenho da busca aleatória, é necessário escolher uma métrica que represente adequadamente o tempo de expedição desde a posição inicial até o alvo. A escolha mais intuitiva seria o valor médio do tempo de primeira passagem, $\langle t \rangle$.

No entanto, devido ao comportamento em lei de potência da DTPP, essa métrica é, na maioria dos casos, divergente, tal como ocorre no caso homogêneo (Seção 2.6). Essa divergência decorre da contribuição de eventos raros com tempos extremamente longos, que tornam o valor médio também muito elevado, comprometendo sua utilidade para caracterizar a busca nesse contexto. Como alternativa, podemos analisar os momentos de ordem q da DTPP

$$\langle t^q \rangle = \frac{\Gamma(b-q)}{\Gamma(b)} \left(\frac{y_0}{2} \right)^{2q}. \quad (3-17)$$

Essa expressão mostra que o momento de ordem q é finito apenas se $q < b$. Neste caso, utilizamos o primeiro momento negativo, $\langle t^{-1} \rangle$, que é particularmente interessante por fornecer um resultado finito, já que as contribuições associadas a tempos muito longos tendem a zero, explicitamente possui a forma de

$$\langle t^{-1} \rangle = \frac{4b}{y_0^2}. \quad (3-18)$$

Adotamos, portanto, $\langle t^{-1} \rangle$ como a principal métrica para quantificar o desempenho das buscas aleatórias no cenário considerado. A partir deste ponto, utilizaremos o termo eficiência de busca para nos referirmos ao primeiro momento negativo, conforme definido na Seção 2.5.1.

3.1.3.1

Eficiência de busca

A eficiência da busca, definida na Eq. (2-73), foi calculada anteriormente e resulta em $\mathcal{E} = 4b/y_0^2$. Reescrevendo essa expressão na variável original do problema, x_0 , obtemos

$$\mathcal{E} = \frac{D_0}{x_0^{2-\alpha}} \left(1 - \frac{2-A}{2} \alpha \right) (2-\alpha). \quad (3-19)$$

Esta equação (3-19) resume os efeitos da heterogeneidade produzida por α , sob diferentes interpretações. Quando $\alpha = 0$, a eficiência padrão para o caso homogêneo, $\mathcal{E}_H = 2D_0/x_0^2$ (Eq. (2-74)) é recuperada. Na Fig. 3.3, apresentamos

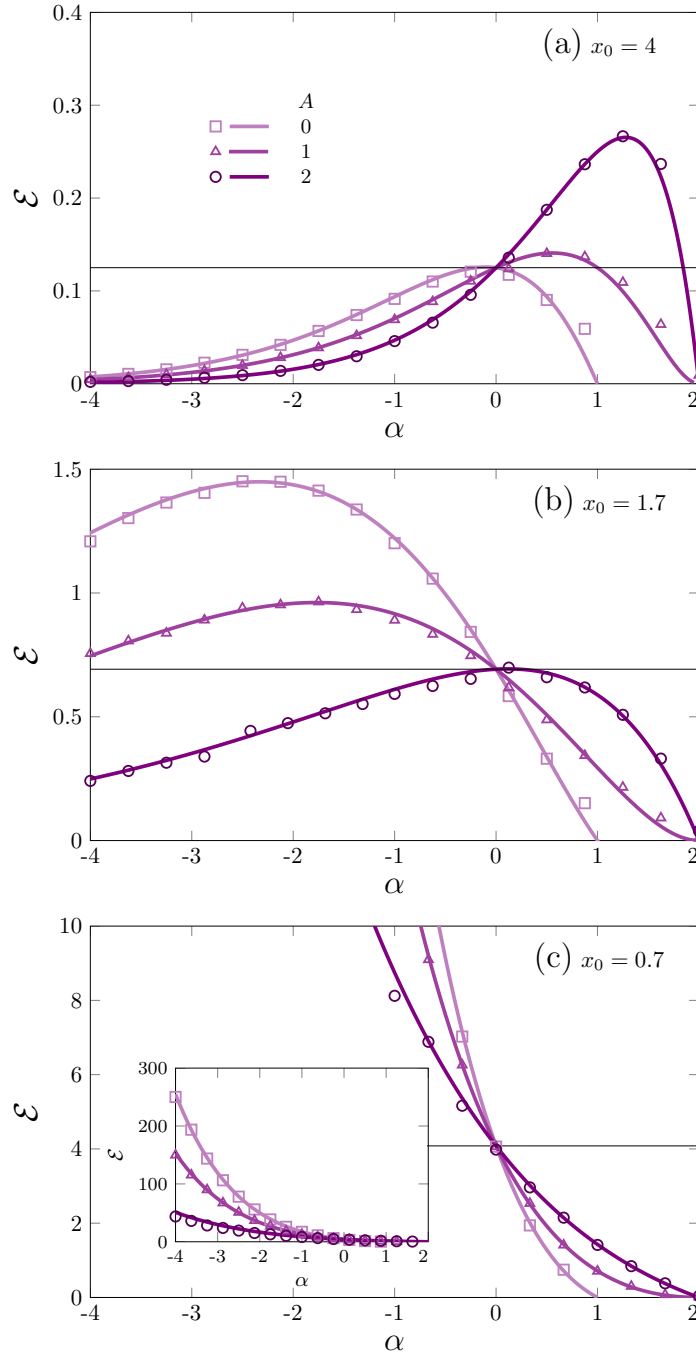


Figura 3.3: Eficiência versus α para diferentes interpretações do PDH (valores de A indicados na legenda), usando $D(x) = D_0 x^\alpha$, com $D_0 = 1$. Cada painel corresponde a um valor diferente de x_0 . A previsão dada pela Eq. (3-19) é mostrada por linhas contínuas, e a média sobre 10^5 realizações da Eq. (2-33) com fronteira absorvente em $x = 0$ é representada por símbolos. Em cada caso, é mostrada a média. A linha horizontal contínua corresponde ao valor homogêneo $\mathcal{E}_H = 2D_0/x_0^2$.

gráficos da eficiência \mathcal{E} em função do expoente α , para diferentes valores do parâmetro A , obtidos a partir da Eq. (3-19) e em excelente concordância com os resultados numéricos da Eq. (2-33).

Nas Figs. 3.3(a)-(b), com $x_0 > 1$, observa-se a existência de um valor ótimo α_{\max} , que se desloca para a direita à medida que o processo se torna menos antecipante (ou seja, para valores maiores de A). A eficiência ótima $\mathcal{E}(\alpha_{\max})$ decresce com x_0 , como esperado, mas aumenta com A para posições iniciais suficientemente distantes (caso (a)). No entanto, essa tendência se inverte no caso (b). Para $x_0 \leq 1$ (Fig. 3.3(c)), a eficiência decresce monotonicamente com α , para qualquer valor de A , sendo divergente no limite $\alpha \rightarrow -\infty$. Esse comportamento reflete o fato de que, nesse limite, a difusividade cresce muito rapidamente ao redor do alvo, o que acelera fortemente a chegada do caminhante à origem, resultando em uma eficiência alta.

Como característica geral, nota-se que, para x_0 e α fixos, a interpretação adotada para o PDH modifica a eficiência. Quando a difusividade aumenta com a distância até o alvo ($\alpha > 0$), a eficiência é maior quanto menos antecipante é o processo (ou seja, quanto maior é A), mas a eficiência é reduzida caso contrário. Assim, um dado comportamento da difusividade ao redor do alvo (regido por α) pode ser influenciado pelas correlações (regidas por A) no movimento do caminhante. Processos caracterizados por diferentes valores de A terão desempenhos diferentes. Portanto, descrever um dado processo com um valor inadequado de A pode levar a uma estimativa errada da eficiência.

3.2

Busca aleatória no cenário de Stratonovich

Nesta seção, abordamos o problema de busca considerando a interpretação de Stratonovich ($A = 1$), sob esta prescrição é possível obter resultados para qualquer forma do perfil de difusividades $D(x)$. Iniciamos reescrevendo a Eq. (3-3), que torna-se

$$\frac{\partial}{\partial t} Q(y_0, t) = \frac{\partial^2}{\partial y_0^2} Q(y_0, t). \quad (3-20)$$

Note que para $A = 1$ o termo de arraste da Eq. (2-57) é zero, sendo o único termo dependente explicitamente da forma funcional de $D(x)$. Agora a informação da difusividade heterogênea está embutida em y_0 . Assim a solução da Eq. (3-20) na variável y_0 é válida para qualquer forma de $D(x)$. Para obtê-la, vamos aplicar a transformada de Laplace, resultando em

$$\frac{\partial^2}{\partial y_0^2} \tilde{Q}(y_0, s) - s\tilde{Q}(y_0, s) = -1, \quad (3-21)$$

cuja solução geral obedece

$$\tilde{Q}(y_0, s) = c_1 e^{-\sqrt{s}y_0} + c_2 e^{\sqrt{s}y_0} + \frac{1}{s}. \quad (3-22)$$

A constante c_2 deve ser igual a zero para que a solução descrita na Eq. (3-22) seja finita em $y_0 \rightarrow \infty$. A condição de contorno, $\tilde{Q}(0, s)$, faz com que a constante sobressalente torne-se $c_1 = -1/s$. Assim

$$\tilde{Q}(y_0, s) = \frac{1}{s} [1 - e^{\sqrt{s}y_0}]. \quad (3-23)$$

A transformada inversa de Laplace da Eq. (3-23) resulta em

$$Q(y_0, t) = \operatorname{erf}\left(\frac{y_0}{2t^{\frac{1}{2}}}\right), \quad (3-24)$$

em que erf é a função erro.

A DTPP pode ser obtida diretamente da Eq. (3-24), usando a definição da Eq. (2-61), sendo

$$\wp(t) = \frac{y(x_0)e^{-\frac{y(x_0)^2}{4t}}}{2\sqrt{\pi}t^{\frac{3}{2}}}. \quad (3-25)$$

Quando $D(x)$ é uma lei de potência, recuperamos o resultado da Eq. (3-11) para $A = 1$.

Utilizando $\wp(t)$ na Eq. (3-25), computamos a eficiência definida na Eq. (2-73) $\mathcal{E} = \langle t^{-1} \rangle = \int \wp(t)t^{-1}dt$, e através da mudança de variáveis $z = y_0^2/(4t)$, obtemos $\mathcal{E} = \frac{4}{y_0^2} \int_0^\infty \frac{e^{-z}}{\sqrt{\pi}} z^{\frac{1}{2}} dz = \frac{2}{y_0^2}$. Portanto,

$$\mathcal{E} = \frac{2}{\left(\int_0^{x_0} [D(x')]^{-\frac{1}{2}} dx'\right)^2}. \quad (3-26)$$

Este resultado é válido para perfis arbitrários de difusividade $D(x)$. Note que a eficiência depende apenas do comportamento do perfil no intervalo $(0, x_0)$. Além disso, como o integrando depende apenas de $D(x)$, a eficiência não depende da ordem dos valores no perfil de difusividades. Ou seja, mesmo que fragmentemos o perfil e embaralhemos os pedaços [52], o valor da integral permanece inalterado.

Podemos demonstrar isso se valendo da discretização da Eq. (3-26). Primeiramente, para evidenciar variações ξ em torno de um valor de referência D_0 , escrevemos $D(x) = D_0[1 + \xi(x)]$, com $\langle \xi \rangle = 0$ no intervalo $x \in [0, x_0]$, e impomos $\xi > -1$ para garantir que $D(x)$ permaneça positivo. Enfim, consideramos agora a versão discretizada da Eq. (3-26)

$$\mathcal{E} = \frac{2D_0}{x_0^2} \frac{1}{\left(\frac{x_0}{\sqrt{D_0}} \cdot \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (1 + \xi_i)^{-1/2}\right)^2}. \quad (3-27)$$

Sob as restrições sobre o conjunto $\{\xi_i\}$, queremos verificar que

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [1 + \xi_i]^{-1/2} \geq 1. \quad (3-28)$$

Para iso definimos uma função,

$$h(\{\xi_i\}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [1 + \xi_i]^{-1/2}, \quad (3-29)$$

a qual estamos interessados em seus valores extremos sob a restrição de que

$$g(\{\xi_i\}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \xi_i = 0. \quad (3-30)$$

Introduzindo a Lagrangeana sob a forma

$$\mathcal{L}(\{\xi_i\}, \lambda) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[(1 + \xi_i)^{-1/2} - \lambda \xi_i \right], \quad (3-31)$$

minimizando-a em relação a cada ξ_i , obtemos

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \xi_i} = -\frac{1}{2}(1 + \xi_i)^{-3/2} - \lambda = 0 \Rightarrow (1 + \xi_i)^{-3/2} = -2\lambda. \quad (3-32)$$

Como o lado esquerdo é positivo (pois $\xi_i > -1$), concluímos que $\lambda < 0$, e todos os ξ_i devem ser iguais. Imposta a condição $\langle \xi_i \rangle = 0$, segue que $\xi_i = 0$ para todo i . No limite contínuo, isso implica que $y_0 \geq x_0/\sqrt{D_0}$, o que leva à desigualdade

$$\mathcal{E} = \frac{2}{y_0^2} \leq \frac{2D_0}{x_0^2} = \mathcal{E}_H. \quad (3-33)$$

Portanto, a eficiência de um perfil heterogêneo é sempre inferior ou igual à de um perfil homogêneo com difusividade constante de mesmo nível médio do perfil heterogêneo.

Na seguintes seções ilustraremos tais propriedades com alguns exemplos: uma quebra localizada de homogeneidade, um sistema com dois níveis de difusividade e por último o perfil oscilatório. Além disso, discutiremos o caso de um perfil estocástico.

3.2.1

Heterogeneidade localizada

Analisamos um perfil que apresenta uma perturbação local da difusividade em torno do nível D_0 . Escolhemos o perfil de modo que o nível médio de difusividade D_0 permaneça o mesmo no intervalo $[0, x_0]$. Em outras palavras, fazemos um rearranjo espacial da difusividade, de modo que a difusividade global do alvo até a posição inicial x_0 sempre seja a mesma. A heterogeneidade local representada na Fig. 3.4 possui largura $0 \leq w \leq x_0$ e amplitude $0 \leq h \leq 1$ e é de escrita da seguinte forma

$$D(x) = D_0 \left(1 - h \Theta(x - \ell) + 2h \Theta\left(x - \ell - \frac{w}{2}\right) - h \Theta(x - \ell - w) \right) \quad (3-34)$$

Para essa difusividade constante por partes, a Eq. (3-26) fornece a eficiência de busca

$$\mathcal{E} = \frac{2D_0}{\left(x_0 - w + w \frac{\sqrt{1+h} + \sqrt{1-h}}{2\sqrt{1-h^2}}\right)^2} \leq \mathcal{E}_H. \quad (3-35)$$

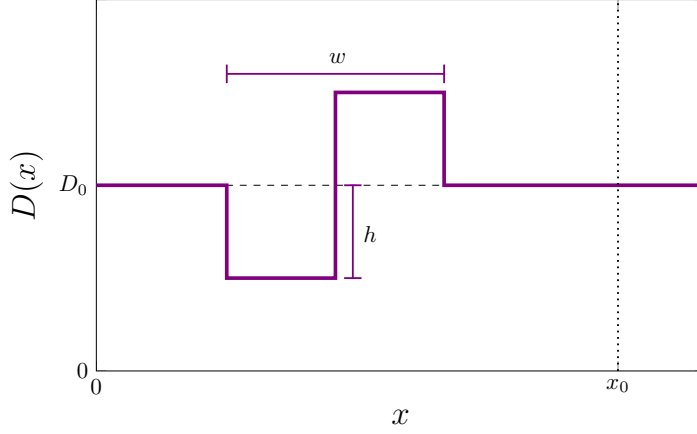


Figura 3.4: Heterogeneidade localizada de largura w e amplitude h , ao redor do nível D_0 (Eq. (3-34)) representado pela linha tracejada. A linha pontilhada vertical destaca a posição inicial.

Para $w = 0$ ou $h = 0$, recupera-se o valor padrão \mathcal{E}_H , enquanto para valores crescentes de w e $|h|$, a eficiência decai, como pode ser visualizado na Fig. 3.5. Isso significa que, em um perfil heterogêneo que preserva o nível médio D_0 , na interpretação de Stratonovich, a busca é menos eficiente do que em um ambiente homogêneo de mesmo nível médio de difusividade. Observe também que, de acordo com a Eq. (3-26), um deslocamento deste pulso não afeta o valor da eficiência, desde que o pulso permaneça contido dentro do intervalo de integração $[0, x_0]$. Além disso, a fragmentação do pulso em menores não alterará o valor de \mathcal{E} , desde que o comprimento total das regiões de difusividades alta e baixa seja o mesmo. Ademais, observe que a Eq. (2-53) é a mesma para qualquer valor de A , desde que estejamos em regiões onde a difusividade é constante. A condição de continuidade do fluxo de densidade na interface, dada por $D_1 \partial_x p_1 = D_2 \partial_x p_2$, também independe de A . No entanto, a condição de continuidade para a densidade, $D_1^{A/2} p_1 = D_2^{A/2} p_2$, depende de A [29]. Portanto, a eficiência \mathcal{E} pode depender do valor de A .

Na Fig. 3.6, comparamos numericamente as eficiências para as diferentes interpretações além da de Stratonovich. Observa-se que, nas prescrições anti-Itô (3.6a) e Itô (3.6b), as eficiências coincidem para os respectivos valores de w e h , além de recuperarem o caso homogêneo quando $h = 0$. Por outro lado, na interpretação de Stratonovich (3.6b), as eficiências diferem em relação às demais interpretações. Os resultados mostrados na Fig. 3.6 sugerem

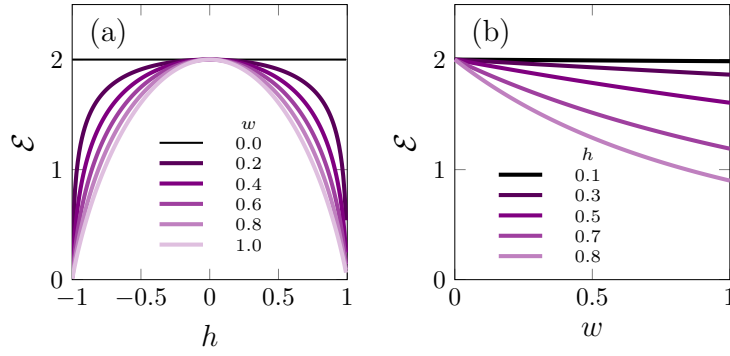


Figura 3.5: Eficiência em função do parâmetro h para o perfil descrito na Eq. (3-34) e esquematizado na Fig. 3.4, para diferentes valores de w . Note que em todos os casos a eficiência é inferior à do caso homogêneo. As linhas horizontais correspondem a \mathcal{E}_H , o valor para o caso homogêneo com difusividade de mesmo nível médio.

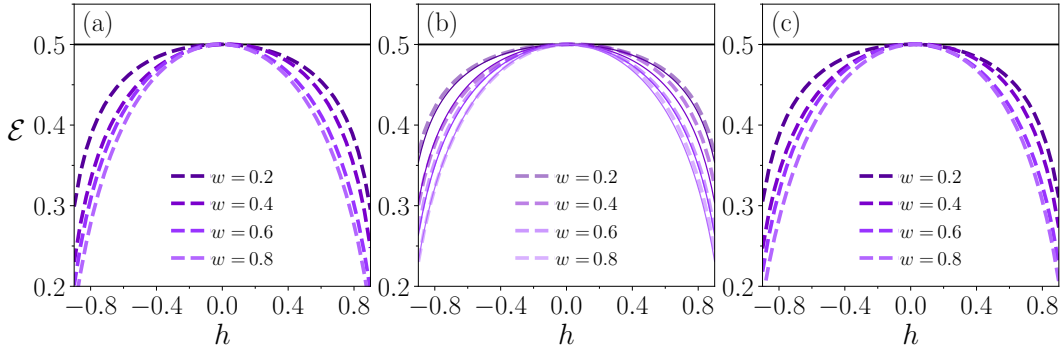


Figura 3.6: Eficiência para o perfil de difusividades descrito pela Eq. (3-34), variando h e w para diferentes interpretações. (a) Interpretação anti-Itô ($A = 0$). (b) Stratonovich $A = 1$. (c) Itô ($A = 2$). Nos casos (anti) Itô, painéis (a) e (c) os resultados foram obtidos a partir de integração numérica, representados pelas linhas tracejadas. Para o caso de Stratonovich, painel (b), além dos resultados numéricos representados pelas linhas tracejadas as soluções analíticas, obtidas pela Eq. (3-35), são representadas por linhas finas. Foram considerados $x_0 = 2.0$ e $\ell = 1.0$.

um valor de eficiência superior para Stratonovich. Ainda nessa prescrição ($A = 1$), nota-se uma boa concordância entre os resultados numéricos (linhas tracejadas) e os resultados analíticos (linhas finas). Vale ressaltar que o comportamento qualitativo para esse perfil é o mesmo nos três casos, a inclusão de heterogeneidade reduz a eficiência da busca.

3.2.2

Difusividade em dois níveis

Abordaremos o caso em que o perfil apresenta dois níveis distintos de difusividade, D_- e D_+ . Esse tipo de configuração é particularmente interessante, pois é justamente o que ocorre em líquidos com difusividades diferentes

separados por uma interface. Sistemas bifásicos desse tipo têm ampla aplicação em processos de filtragem e separação de polímeros compatíveis, entre outras aplicações [24]. Definimos o perfil da seguinte maneira

$$D(x) = D_0 [(1 - h) + 2h \Theta(x - \ell)], \quad (3-36)$$

que está representado na Fig. 3.7(a). Aplicando diretamente a definição da eficiência para Stratonovich, obtemos

$$\mathcal{E} = \frac{2D_0(1 - h^2)}{[\ell \sqrt{1 + h} + (x_0 - \ell)\sqrt{1 - h}]^2}. \quad (3-37)$$

Neste caso, existem duas situações distintas em relação ao perfil de difusivi-

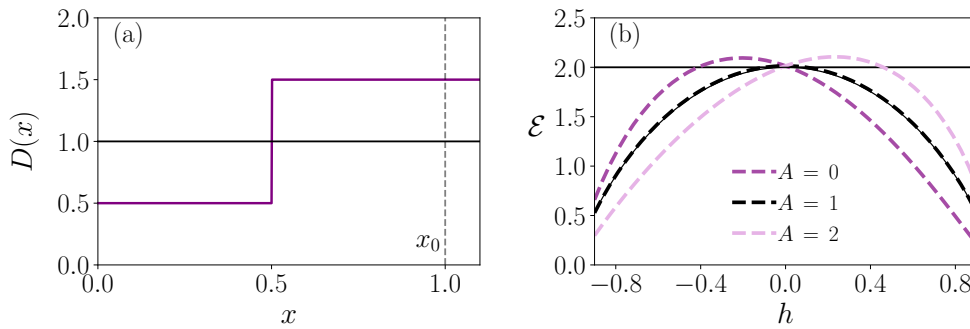


Figura 3.7: (a) Perfil de difusividades em dois níveis descrito pela Eq. (3-36), com $\ell = h = \frac{1}{2}$. A linha preta indica o nível médio de difusividade. (b) Eficiência correspondente ao perfil de dois níveis. As linhas tracejadas foram obtidas numericamente, enquanto a linha preta contínua (apenas caso $A = 1$) corresponde a solução analítica dada pela Eq. (3-37). Com $x_0 = 0$, demais parâmetros correspondem aos descritos para o painel (a).

dade. Na primeira, com $h > 0$, a difusividade é menor nas proximidades do alvo em $x = 0$. Na segunda, correspondente a $h < 0$, ocorre o oposto, a região de maior difusividade está próxima do alvo, enquanto a difusividade é menor na vizinhança da posição inicial da busca, em x_0 . Em nossas análises, adotamos $x_0 = 2\ell$ de forma a garantir a simetria do problema. Com essa escolha, o caminhante percorre o intervalo $[0, \ell]$ sob a influência de um dos patamares de difusividade, enquanto no intervalo $[\ell, 2\ell]$ está sujeito ao patamar alternativo.

No que diz respeito a eficiência da busca, para Stratonovich, Eq. (3-37), o efeito da inclusão de heterogeneidade é similar ao caso anterior, ou seja, para qualquer valor de h a busca no ambiente heterogêneo é menos eficiente em comparação ao caso homogêneo. Ainda para o caso $A = 1$ (Stratonovich), a eficiência é simétrica perante a troca de sinal de h dependendo apenas de seu valor absoluto, isto é representado pelas linhas pretas na Fig. 3.7 (b). Note que existe uma boa concordância entre o resultado numérico (linha preta tracejada

na Fig. 3.7 (b)) e o resultado analítico dado pela Eq. (3-37) (linha preta fina Fig. 3.7(b)).

Para a interpretação de Itô ($A = 2$), a Fig. 3.7(b) mostra que, em uma certa faixa de valores de h , a eficiência supera a do caso homogêneo. Essa melhora ocorre para uma estreita região com $h > 0$, ou seja, quando o patamar de maior difusividade está localizado em torno da posição inicial x_0 , e o patamar de menor difusividade se encontra próximo ao alvo. O oposto acontece quando consideramos a interpretação anti-Itô ($A = 0$), neste caso a eficiência supera a do caso homogêneo para valores negativos de h . Em suma, o cenário aqui se assemelha ao discutido no caso do perfil em lei de potência: quando a difusividade aumenta com a distância até o alvo, as interpretações menos antecipantes tendem a apresentar maior eficiência. Por outro lado, quando a difusividade diminui com a distância, são as interpretações mais antecipantes que exibem maior eficiência.

A Fig. 3.7(b) também sugere uma relação de simetria de eficiência entre as interpretações de Itô e anti-Itô em torno do sinal de h . Ou seja, $\mathcal{E}_{A=2}(h) = \mathcal{E}_{A=0}(-h)$. A troca de sinal h do perfil de difusividades da Eq. (3-36) também pode ser obtida através de uma reflexão do perfil em torno de x_0 , ou seja, $\hat{\mathcal{R}}D(x) = D(x_0 - x)$, em que $\hat{\mathcal{R}}$ é o operador de reflexão.

3.2.3

Difusividade oscilante

Nesta seção, analisamos um perfil de difusividade oscilatório. Essa escolha se justifica por incorporar diversos comportamentos de interesse, incluindo casos anteriores: como o de um pulso (isto é, uma oscilação completa entre o alvo e a posição inicial x_0), o de dois níveis de difusividade que crescem ou decrescem a partir do alvo, além do regime de oscilações de alta frequência. O perfil analisando possui a seguinte forma

$$D(x) = D_0 [1 + d \cos(kx)], \quad (3-38)$$

onde as oscilações ocorrem em torno do nível de referência D_0 , com $-1 \leq d \leq 1$ e número de onda k . Integrando numericamente a expressão geral para a eficiência, Eq. (3-26), utilizando $D(x)$ na Eq. (3-38), mostramos os resultados na Fig. 3.8.

Para uma comparação justa com o caso homogêneo, consideremos oscilações cuja média em torno de D_0 se anula. Isso ocorre quando $kx_0 = N\pi$, com N inteiro, e também no limite de comprimento de onda muito curto em comparação com x_0 (ou seja, $\lambda = 2\pi/k \ll x_0$). Para N inteiro, obtemos

$$\mathcal{E}_0 \simeq \mathcal{E}_H \frac{(1+d)\pi^2}{4[\kappa(\frac{2d}{1+d})]^2} \leq \mathcal{E}_H, \quad (3-39)$$

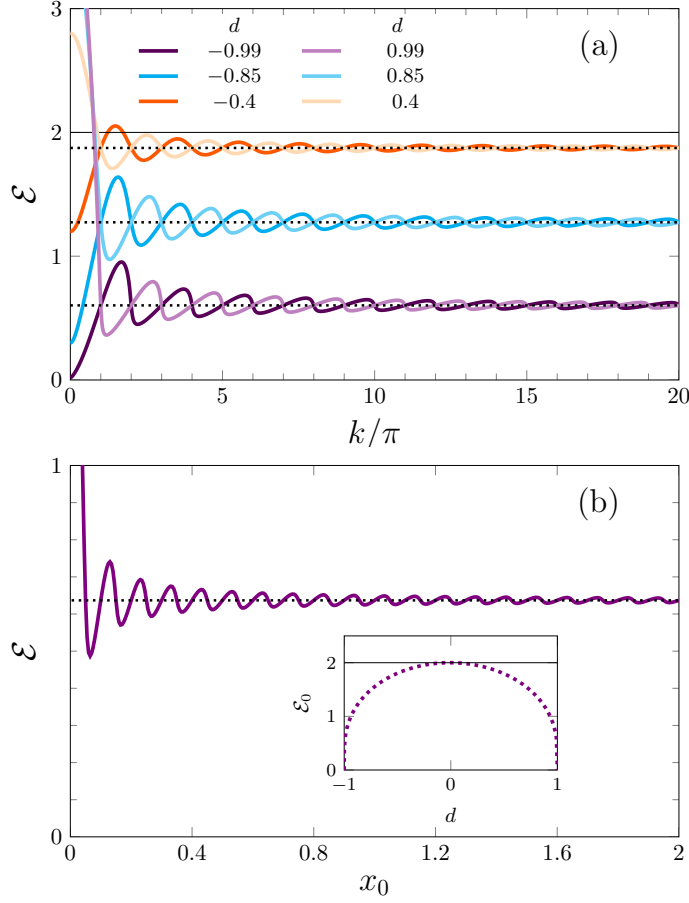


Figura 3.8: (a) Eficiência \mathcal{E} para $D(x) = D_0[1 + d \cos(kx)]$ em função de k , para diferentes valores de d . As linhas horizontais tracejadas correspondem ao respectivo limite de comprimentos de onda curtos dado pela Eq. (3-39). Fixamos $x_0 = 1$ e $D_0 = 1$. Na Fig. (b), plotamos \mathcal{E} em função de x_0 , para $k = 20\pi$, $D_0 = 1$ e $d = 0.85$. No gráfico em destaque, plotamos o limite de comprimento de onda curto \mathcal{E}_0 (linha tracejada) em função de d , e para comparação, a eficiência do caso homogêneo correspondente \mathcal{E}_H (linha horizontal fina).

onde $\kappa(z) = \frac{\pi}{2} {}_2F_1(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, z)$ é a integral elíptica completa de primeira espécie e ${}_2F_1(a, b, c, z)$ é a função hipergeométrica [80]. O limite de comprimentos de onda curtos \mathcal{E}_0 , para cada d , é mostrado na Fig. 3.8 pelas linhas horizontais tracejadas. Observe que, de fato, ele é atingido para N inteiros ou grandes valores de k . Esse valor limite é independente da introdução de uma constante de fase na Eq. (3-38), como pode ser observado quando d muda de sinal. Mais importante ainda, a Eq. (3-39) é máxima para $d = 0$, onde assume o valor \mathcal{E}_H . Ou seja, a eficiência \mathcal{E}_0 permanece abaixo da do caso homogêneo com a mesma difusividade média. Este é um resultado notável que indica que as oscilações de comprimento de onda curto da difusividade prejudicam a eficiência da busca, que decai com o aumento de d , como representado pela linha tracejada na Fig. 3.8(b). Em contraste, para valores pequenos de k , o valor da eficiência pode

ser maior que \mathcal{E}_H , mas isso simplesmente reflete um nível médio de difusividade D_0 maior dentro do intervalo $[0, x_0]$.

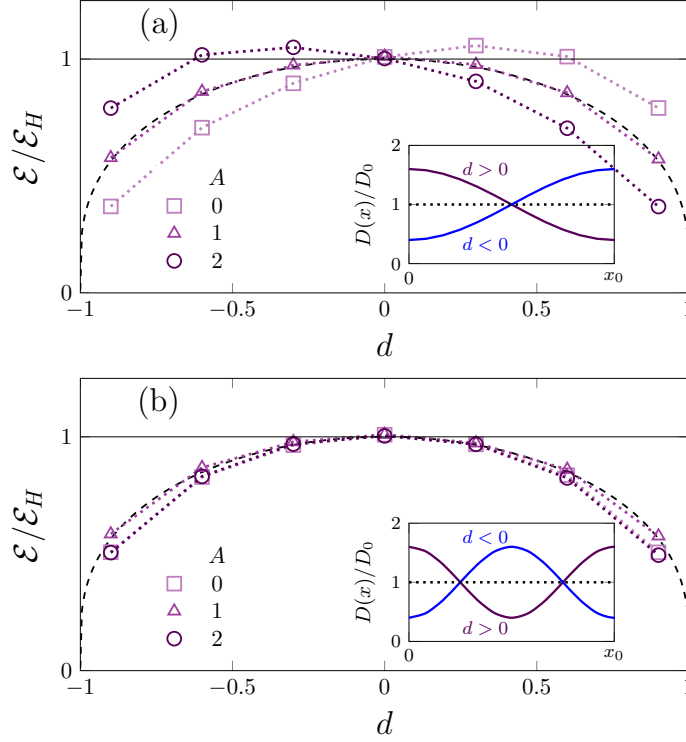


Figura 3.9: Eficiência relativa $\mathcal{E}/\mathcal{E}_H$ versus d , utilizando diferentes valores de A , para os perfis (a) $D(x) = D_0[1 + d \cos(\pi x/x_0)]$ e (b) $D(x) = D_0[1 + d \cos(2\pi x/x_0)]$. Em todos os casos, a previsão dada pela Eq. (3-39) para o caso Stratonovich (linha tracejada) e o valor homogêneo (linha cheia horizontal), ambos normalizados por \mathcal{E}_H , estão representados. Os símbolos correspondem à média sobre 10^5 realizações do processo na Eq. (2-33), com condição de fronteira absorvente em $x = 0$. Os perfis de difusividade estão ilustrados nos gráficos em detalhe.

Agora, para o perfil oscilatório, comparamos esses resultados com os obtidos a partir de realizações da Eq. (2-33), considerando diferentes interpretações. Os gráficos da eficiência em função de d são apresentados na Fig. 3.9. Foram considerados casos em que $kx_0 = n\pi$, com n inteiro, de modo que o nível médio da difusividade seja D_0 .

Na Fig. 3.9(a), onde usamos perfis que são monotônicos em $(0, x_0)$, podemos observar várias características. Para $A = 1$, a eficiência é insensível à ordenação, como foi provado ao longo desta seção, então há uma simetria de inversão em torno de $d = 0$. No entanto, observe que essa simetria é quebrada para as outras interpretações, o que significa que a forma do perfil é relevante, e não apenas a distribuição dos valores quando $A \neq 1$. Além disso, observamos que quando o perfil aumenta com a distância do alvo ($d < 0$), a eficiência aumenta com A maior, enquanto o contrário ocorre para um perfil decrescente

($d > 0$). Esse é o mesmo comportamento observado para o perfil em dois níveis, mostrado numericamente na Seção 3.2.2, e também o mesmo comportamento demonstrado analiticamente no caso do perfil em lei de potência, analisado na Seção 3.1. Finalmente, note que enquanto para $A = 1$ a eficiência permanece abaixo daquela do perfil homogêneo, como previsto teoricamente, isso pode ser violado para as outras interpretações, de acordo com o resultado das simulações estocásticas.

Na Fig. 3.9 (b), onde os perfis de difusividade não são monotônicos, mas simétricos no intervalo $(0, x_0)$, a eficiência também aparenta ser simétrica em torno de $d = 0$. Essa situação é análoga ao perfil tipo onda quadrada explorado na Seção 3.2.1, caso que também há uma oscilação completa da difusividade no intervalo $[0, x_0]$. Nesse contexto, as eficiências correspondentes às interpretações de Itô ($A = 2$) e anti-Itô ($A = 0$) não apenas coincidem entre si, mas também exibem simetria em relação a $d = 0$. Além disso, para amplitudes maiores (valores elevados de $|d|$), observa-se que a eficiência nas interpretações de Itô e anti-Itô é inferior à da interpretação de Stratonovich ($A = 1$), mantendo-se sempre abaixo da eficiência correspondente ao caso homogêneo.

3.2.4

Difusividade aleatória

Como discutido em conexão com a Eq. (3-33), perfis de difusividade embaralhados no intervalo $(0, x_0)$ produzem a mesma eficiência dentro do quadro de Stratonovich. Isso nos leva a considerar perfis ruidosos de difusividade, do tipo $D(x) = D_0(1 + \xi)$, flutuando ao redor do nível D_0 , tomando valores aleatórios não correlacionados ξ com uma dada PDF $f(\xi)$, onde $\xi \in (-1, \infty)$, de forma que a média $\langle \xi \rangle = \int_{-1}^{\infty} \xi f(\xi) d\xi = 0$. Seguindo essa ideia, a Eq. (3-26) pode ser reescrita como

$$\mathcal{E} = \frac{\mathcal{E}_H}{\left(\int_{-1}^{\infty} [1 + \xi]^{-\frac{1}{2}} f(\xi) d\xi \right)^2} \leq \mathcal{E}_H, \quad (3-40)$$

onde o limite superior vem da desigualdade

$$\int_{-1}^{\infty} [1 + \xi]^{-\frac{1}{2}} f(\xi) d\xi \geq 1. \quad (3-41)$$

Considerando que $\xi(x) = D(x)/D_0 - 1$, onde x pode ser interpretado como uma variável aleatória uniforme no intervalo $[0, x_0]$, através do método de mudança de variáveis, podemos obter $f(\xi)$. Por exemplo, no caso de $D(x) = D_0[1 + d \cos(n\pi x/x_0)]$, considerado na Seção 3.2.3, temos $f(\xi) = [1 - \xi^2/d^2]^{-\frac{1}{2}}/(\pi d)$, para $\xi \in (-d, d)$, o que, substituído na Eq. (3-40), permite

recuperar a Eq. (3-39).

3.3

Conclusão do capítulo

Neste capítulo obtivemos expressões analíticas para $\mathcal{E} = \langle 1/t \rangle$ como uma medida do desempenho de buscas aleatórias quando o meio é heterogêneo para um domínio de busca ilimitado.

Consideramos interpretações associadas a PDH arbitrárias, parametrizadas pelo parâmetro A , desenvolvemos o caso de uma perfil de difusividade que segue uma lei de potência com expoente $\alpha < 2$, a qual abrange situações em que a mobilidade cresce ou decresce com a distância em relação ao alvo. Observamos que, dependendo da posição inicial do caminhante, pode haver um valor ótimo de α , que depende de A . Mas um máximo finito nem sempre ocorre. A característica geral é que, para um processo com A maior, a busca possui maior eficiência quando a difusividade aumenta com a distância do alvo ($\alpha > 0$) e dificulta a busca caso contrário. Além disso, isso não é exclusivo da forma em lei de potência, mas é determinado pelo caráter monotônico da difusividade.

Considerando a interpretação de Stratonovich ($A = 1$), derivamos uma expressão fechada para a eficiência válida para formas arbitrárias de $D(x)$. Analisamos, nesse regime, três casos específicos: uma perturbação localizada com formato de onda quadrada contendo um período completo de oscilação, um perfil com dois níveis distintos de difusividade e um perfil oscilatório contínuo. Concluimos que tais heterogeneidades reduzem a eficiência em relação ao caso homogêneo com o mesmo nível médio de difusividade no intervalo $(0, x_0)$. É importante notar que, nesse contexto, a forma espacial do perfil dentro desse intervalo não influencia o resultado — apenas o conjunto de valores que compõem o perfil, os quais determinam a integral na Eq. (3-26). Assim, um perfil ruidoso com a mesma distribuição de valores produz os mesmos resultados.

Também comparamos a eficiência obtida nesses perfis para outras interpretações ($A \neq 1$), seja numericamente, seja por simulações estocásticas. Para perfis não monotônicos, que apresentam uma oscilação completa entre a posição inicial e a posição do alvo, as interpretações de Itô e anti-Itô produzem resultados equivalentes. Já no caso de perfis monotônicos, as eficiências não coincidem, mas exibem simetria quando o perfil é refletido em torno de x_0 .

4

Busca aleatória em meios heterogêneos finitos

Como continuação natural do capítulo anterior, estendemos nossas análises para um domínio de busca limitado de tamanho L . Essa extensão é motivada por situações mais realistas, em que a busca não se estende indefinidamente no espaço.

Iniciamos investigando a DTPP considerando a interpretação de Stratonovich. Como no capítulo anterior, essa interpretação nos permite obter resultados para perfis de difusividade $D(x)$ arbitrários. No caso limitado, além da eficiência $\langle 1/t \rangle$, calculamos a quantidade $1/\langle t \rangle$, que pode ser interpretada como uma segunda medida de eficiência. Ilustramos os resultados para alguns perfis de difusividade. Também consideramos interpretações arbitrárias. Neste cenário, para a eficiência $1/\langle t \rangle$, obtemos uma expressão válida para qualquer $D(x)$; já para a eficiência $\langle 1/t \rangle$, encontramos expressões apenas para formas particulares de $D(x)$. Ao final, discutimos o impacto dos perfis e das diferentes interpretações no desempenho das buscas.

4.1

Eficiência de busca sob a interpretação de Stratonovich

Iniciamos com a EFP retrógrada para a probabilidade de sobrevivência, Eq. (3-2), sob a interpretação de Stratonovich ($A = 1$), que é escrita como

$$\frac{\partial}{\partial t} Q(x_0, t) = \sqrt{D(x_0)} \frac{\partial}{\partial x_0} \left\{ \sqrt{D(x_0)} \frac{\partial}{\partial x_0} Q(x_0, t) \right\}, \quad (4-1)$$

em que $Q(x_0, t)$ é a probabilidade de sobrevivência. O alvo se encontra na posição $x = 0$ e é novamente representado por uma condição de fronteira absorvente. Para restringir o domínio a um certo comprimento consideramos uma condição de contorno refletora em $x = L$. Assim a solução da Eq. (4-1) deve satisfazer as seguintes condições de contorno

$$Q(x_0 = 0, t) = 0, \quad (4-2)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_0} Q(x_0 = L, t) = 0, \quad (4-3)$$

para todo t , onde $0 \leq x_0 \leq L$.

Para encontrar a solução da Eq. (4-1), aplicamos a transformada de Laplace na variável temporal, e utilizamos a mudança de variável definida na Eq. (2-55), $y(x) = \int_0^x D(x')^{-\frac{1}{2}} dx'$. Após essa mudança de variável, a solução no espaço de Laplace é (o desenvolvimento detalhado está contido no Apêndice

C.1)

$$\begin{aligned}\tilde{Q}(y_0, s) &= \frac{1}{s} \left(1 - \frac{e^{2y_L\sqrt{s}-y_0\sqrt{s}}}{e^{2y_L\sqrt{s}} + 1} - \frac{e^{y_0\sqrt{s}}}{e^{2y_L\sqrt{s}} + 1} \right) \\ &= \frac{1}{s} \left(1 - \frac{\cosh([y_L - y_0]\sqrt{s})}{\cosh(y_L\sqrt{s})} \right),\end{aligned}\quad (4-4)$$

onde definimos $y_L \equiv y(L)$ e $y_0 \equiv y(x_0)$. A transformada de Laplace da DTPP associada à probabilidade de sobrevivência na Eq. (4-4) é dada por

$$\tilde{\varphi}(y_0, s) = 1 - s\tilde{Q}(y_0, s) = \frac{\cosh([y_L - y_0]\sqrt{s})}{\cosh(y_L\sqrt{s})}. \quad (4-5)$$

A Eq. (4-5) pode ser invertida, resultando em

$$\varphi(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\pi(2n+1)}{y_L^2} \operatorname{sen} \left[\pi \left(\frac{1}{2} + n \right) \frac{y_0}{y_L} \right] e^{-\frac{(1/2+n)^2 \pi^2 t}{y_L^2}}, \quad (4-6)$$

em que os detalhes desta inversão são mostrados no Apêndice C.2.

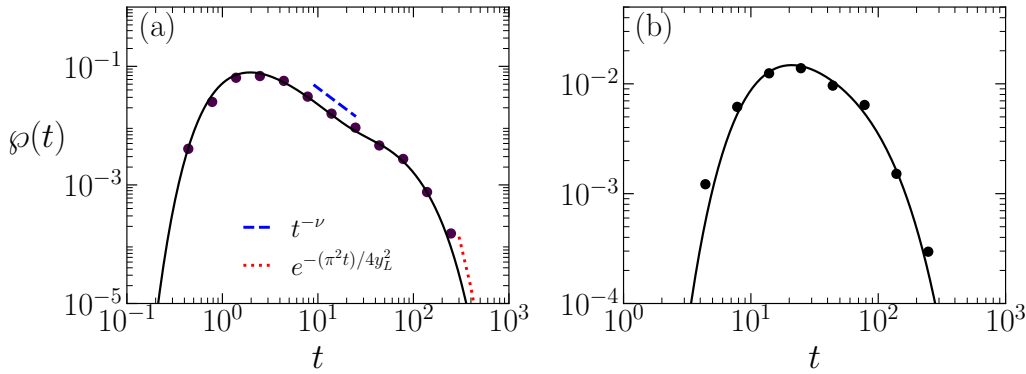


Figura 4.1: DTPP para um perfil de difusividade linear $D(x) = 1 + h(2x/L - 1)$ com $h = 0,8$. As linhas representam a solução analítica dada pela Eq. (4-6), enquanto os símbolos correspondem ao histograma obtido a partir de 10^5 trajetórias simuladas pela Eq. (2-33). (a) Caso com $L = 10$ e $x_0 = 1$. (b) Caso com $L = x_0 = 10$.

A Fig. 4.1(a) mostra a DTPP, obtida a partir da Eq. (4-6), para um perfil de difusividade linear (ver detalhes na legenda), com $x_0 \neq L$. Observa-se que, em tempos intermediários, a DTPP apresenta um decaimento do tipo lei de potência, $\sim t^{-\nu}$, com $1 < \nu \leq 3/2$. Para tempos longos, no entanto, o decaimento assume caráter exponencial. No que diz respeito à Fig. 4.1(b), consideramos o caso $x_0 = L$, para o qual o decaimento exponencial é dominante. Além disso, o regime intermediário com decaimento em lei de potência não é observado. Para ambos os casos apresentados na Fig. 4.1, nota-se que as caudas das distribuições atingem valores desprezíveis muito antes

de tempos infinitamente longos, o que indica que a maioria dos caminhantes encontra o alvo em tempos finitos. Essa característica permite o cálculo do TMPP, já que não há tempos de chegada que façam essa média divergir. Isso contrasta com as situações discutidas no capítulo anterior, nas quais ocorriam tempos de chegada excessivamente longos.

Nas próximas seções, utilizando as expressões obtidas para a DTPP, determinaremos as quantidades $\langle 1/t \rangle$ e $1/\langle t \rangle$. Ambas são válidas para um perfil de difusividade arbitrário $D(x)$, que está incorporado de forma implícita na variável y .

4.1.1

Obtendo $1/\langle t \rangle$

Primeiramente, calculamos TMPP usando $\wp(t) = -\frac{d}{dt}Q(x_0, t)$, isto é,

$$\langle t \rangle = \int_0^\infty t \frac{d}{dt}Q(x_0, t) dt = \tilde{Q}(y_0, s \rightarrow 0). \quad (4-7)$$

Assim, usando a forma de $Q(x_0, t)$ na Eq. (4-4), temos

$$\langle t \rangle = y_L y_0 - \frac{y_0^2}{2}, \quad (4-8)$$

portanto,

$$\langle t \rangle^{-1} = \frac{2}{y_0(2y_L - y_0)}, \quad (4-9)$$

lembrando que $y_L = y(L)$, onde $y(x)$ foi definido na Eq. (2-55).

Note que, se $D(x)$ não crescer mais rápido que x^2 para grandes valores de x , então, $L \rightarrow \infty$ implica $y_L \rightarrow \infty$. Nesse caso, obtemos que $\lim_{L \rightarrow \infty} \langle t \rangle^{-1} = 0$, porque ao explorar a região semi-infinita, $\langle t \rangle$ cresce indefinidamente [11].

4.1.2

Obtendo $\langle 1/t \rangle$

A média $\langle 1/t \rangle$ definida na Eq. (2-73) pode ser reescrita em termos da DTPP (4-5) no espaço de Laplace, como segue

$$\begin{aligned} \langle t^{-1} \rangle &= \int_0^\infty t^{-1} \wp(y_0, t) dt = \int_0^\infty \tilde{\wp}(y_0, s) ds \\ &= \int_0^\infty \frac{\cosh([y_L - y_0]\sqrt{s})}{\cosh(y_L \sqrt{s})} ds. \end{aligned} \quad (4-10)$$

Definindo a variável auxiliar $z = e^{2y_L\sqrt{s}}$, a Eq. (4-10) torna-se

$$\begin{aligned}\langle t^{-1} \rangle &= \int_1^\infty \frac{z^{-\frac{1}{2}\frac{y_0}{y_L}} + z^{\frac{1}{2}\frac{y_0}{y_L}-1}}{2y_L^2} \frac{\log z}{z+1} dz \\ &= \frac{1}{8y_L^2} \left[\psi^{(1)}\left(\frac{y_0/y_L}{4}\right) - \psi^{(1)}\left(\frac{y_0/y_L+2}{4}\right) \right. \\ &\quad \left. - \psi^{(1)}\left(1 - \frac{y_0/y_L}{4}\right) + \psi^{(1)}\left(\frac{1}{2} - \frac{y_0/y_L}{4}\right) \right],\end{aligned}\quad (4-11)$$

com $y_0/y_L \in [0, 1]$, e onde $\psi^{(1)}(z)$ é a função poligama [80].

4.1.3

Propriedades para $x_0 = L$

Note que tanto $1/\langle t \rangle$ quanto $\langle 1/t \rangle$ dependem do perfil de difusividade apenas através de y_0 e y_L , os quais integram uma função da difusividade desde o alvo até x_0 e até L , respectivamente. Isso implica que, curiosamente, embaralhar os valores dos perfis dentro de cada um dos intervalos $(0, x_0)$ e (x_0, L) não alterará os resultados.

O caso particular $x_0 = L$ significa que o caminhante está inicialmente posicionado na parede refletora, o que implica $y_L = y_0$. Nesse caso, os resultados não são alterados ao embaralhar os valores da difusividade em toda a região acessível. Esta é mesma propriedade observada no capítulo anterior (ver Sec. 3.2).

Para o caso de domínio limitado ilustramos este efeito na Fig. 4.2. Consideramos a família de perfis $D(x) = 1 + d \cos(n\pi x/L)$, com $n = 1, 2, \dots, 10$, e $d = \pm 0.5$, os quais contêm todos os mesmos valores com igual probabilidade (como pode ser visto ao esticar e desdobrar). Para qualquer valor inteiro de n , o resultado teórico para cada medida de eficiência (representado por símbolos grandes) permanece invariante. Esses resultados apresentam boa concordância com aqueles obtidos por meio de simulações estocásticas (representados por símbolos pequenos). Além disso, verificamos que para o perfil embaralhado mostrado no gráfico em detalhe (após a decomposição em 200 fragmentos), as simulações de Langevin também produzem o mesmo nível esperado. Cabe destacar que, ao modificar o nível médio D_0 da difusividade, as medidas de eficiência se alteram proporcionalmente. Por isso, para garantir que as comparações sejam justas, adotamos $D_0 = 1$ em todos os casos.

Ademais, para $x_0 = L$, portanto $y_0 = y_L$, a Eq. (4-9) torna-se

$$\langle t \rangle^{-1} \Big|_{y_0=y_L} = \frac{2}{y_L^2}. \quad (4-12)$$

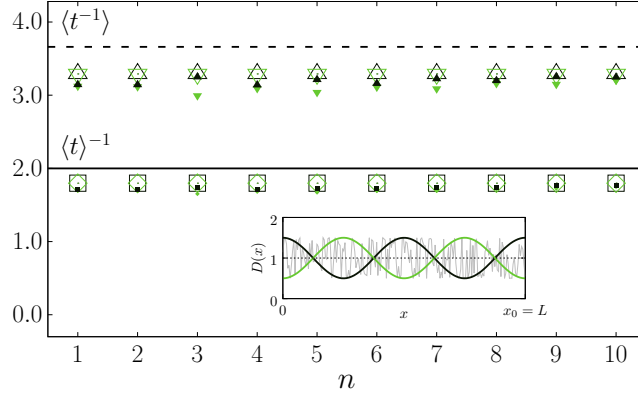


Figura 4.2: Eficiências na Interpretação de Stratonovich: $1/\langle t \rangle$ (grandes triângulos) e $\langle 1/t \rangle$ (grandes quadrados), usando as Eqs. (4-9) e (4-11), respectivamente, para os perfis de difusividade da forma $D(x) = 1 + d \cos(n\pi x/L)$, com $d = \pm 0.5$ (ilustrado no gráfico em detalhe $n = 4$) como função dos valores inteiros de n . Os símbolos pequenos representam as médias correspondentes sobre 10^6 realizações obtidas a partir da integração da Eq. (2-33), utilizando o método de Euler com passo de tempo $10^{-5} \leq \Delta t \leq 10^{-3}$. Em detalhe, incluímos um perfil embaralhado (após fragmentação em 200 segmentos), para o qual se obtemos os mesmos resultados. As linhas horizontais (sólida para $1/\langle t \rangle$ e tracejada para $\langle 1/t \rangle$) representam os valores para o caso homogêneo $d = 0$, que apresentam melhor desempenho do que o caso heterogêneo, segundo ambas as medidas.

Enquanto, utilizando a Eq. (4-10) e a mudança de variável $z = e^{y_L \sqrt{s}}$, obtemos

$$\begin{aligned} \langle t^{-1} \rangle \Big|_{y_0=y_L} &= \int_0^\infty \frac{1}{\cosh(y_L \sqrt{s})} ds = \frac{4}{y_L^2} \int_1^\infty \frac{\log z}{z^2 + 1} dz = \frac{4G}{y_L^2} \\ &\simeq 1.83 \times \frac{2}{y_L^2}, \end{aligned} \quad (4-13)$$

onde $G \simeq 0.915$ é a constante de Catalan. Portanto, existe uma proporcionalidade geral entre ambas as medidas independentemente de $D(x)$, quando o caminhante inicia na parede ($x_0 = L$).

O limite $L \rightarrow \infty$, implicando $y_L \rightarrow \infty$, quando aplicado na Eq. (4-5), conduz a $\tilde{\varphi}(y_0, s) = e^{-y_0 \sqrt{s}}$, o que substituído na primeira linha da Eq. (4-10) imediatamente fornece

$$\langle t^{-1} \rangle \Big|_{y_L \rightarrow \infty} = \frac{2}{y_0^2}. \quad (4-14)$$

Esse resultado é o mesmo obtido no capítulo anterior, onde um ambiente semi-infinito foi investigado. Para um determinado domínio não limitado, partículas distantes do alvo provavelmente o alcançarão em tempos tão longos que terão contribuição negligenciável para $\langle t^{-1} \rangle$. Aqui ressaltamos a coincidência da Eq. (4-14) com a Eq. (4-12) quando $x_0 = L$. Os resultados são resumidos

na Tabela 4.1.

	$x_0 = L$	$L \rightarrow \infty$
$1/\langle t \rangle$	$2/y_L^2$	0
$\langle 1/t \rangle$	$\sim 1.83 \times 2/y_L^2$	$2/y_0^2$

Tabela 4.1: Comparação de casos particulares para interpretação de Stratonovich. Recordando que $(0, L]$ é a região acessível, x_0 é a posição inicial do caminhante, o alvo é posicionado $x = 0$ e $y(x)$ é dada pela Eq. (2-55).

Note que o resultado $\langle 1/t \rangle \geq 1/\langle t \rangle$ é esperado para qualquer valor de x_0 , sendo uma consequência direta da desigualdade de Jensen [81].

No caso $x_0 = L$, ambas as medidas de eficiência são inversamente proporcionais a y_L . Seguindo o mesmo raciocínio apresentado na Seção 3.2 do capítulo anterior, obtemos

$$y_L = \int_0^L D(x)^{-\frac{1}{2}} dx \geq LD_0^{-1/2}, \quad (4-15)$$

onde D_0 é o valor do nível médio de difusividade no intervalo $[0, L]$. A partir disso, a desigualdade (4-15) implica que em um perfil heterogêneo (nonH) o caminhante desempenha a busca de forma menos eficiente do que em um ambiente homogêneo (H) com o mesmo nível médio. Isto é, encontramos como resultado geral, válido para a interpretação de de Stratonovich quando $x_0 = L$, que a eficiência \mathcal{E} , medida tanto por $1/\langle t \rangle$ quanto por $\langle 1/t \rangle$, satisfaz

$$\mathcal{E}_{nonH} \leq \mathcal{E}_H. \quad (4-16)$$

Este efeito é ilustrado na Fig. 4.2, onde os casos homogêneos correspondentes são representados por linhas horizontais, acima dos valores heterogêneos.

4.1.4

Propriedades para posição inicial arbitrária $x_0 \in (0, L]$

Como exemplo, consideramos o perfil linear $D(x) = 1 + h(2x/L - 1)$, que abrange perfis de difusividade que aumentam ($0 < h < 1$) ou diminuem ($-1 < h < 0$) a partir da posição do alvo, além do caso homogêneo ($h = 0$). Note que, se $h > 0$ (resp. < 0), a difusividade aumenta (resp. diminui) ao se afastar do alvo. Além disso, essa família possui nível médio fixo (unitário), garantindo que as comparações com o caso homogêneo sejam justas. Para esses perfis lineares, mostramos, na Fig. 4.3, os resultados teóricos para $\langle 1/t \rangle$ e $1/\langle t \rangle$ em função de x_0 (a) e de L (b), em bom acordo com as simulações. No painel (a), podemos observar que, além de decaírem com a distância x_0 , como esperado, ambas as medidas se aproximam quando $x_0 \rightarrow L$, atingindo a razão $2G$ quando $x_0 = L$, como previsto pelas Eqs. (4-12) e (4-13).

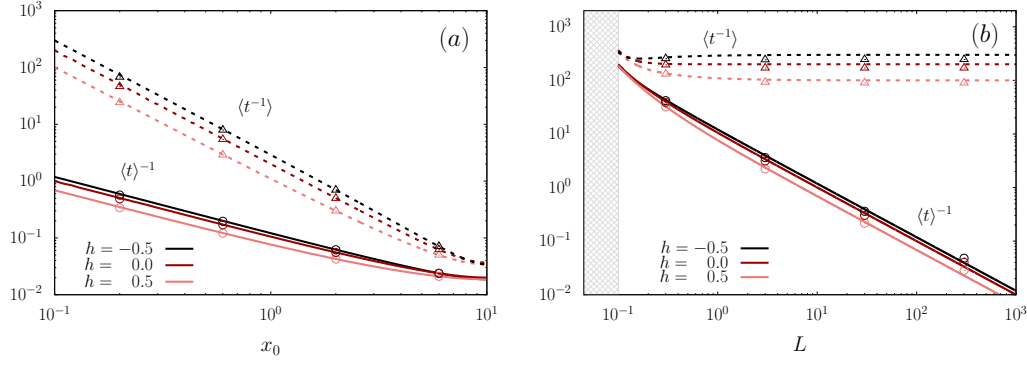


Figura 4.3: Comportamento de $1/\langle t \rangle$ (linhas sólidas) e $\langle 1/t \rangle$ (linhas tracejadas), obtidos a partir das Eqs.(4-9) e (4-11), para o perfil linear de difusividade $D(x) = 1 + h(2x/L - 1)$, considerando diferentes valores de h . No painel (a), variamos a posição inicial x_0 , com $L = 10$ fixo. No painel (b), variamos a posição da fronteira L , mantendo $x_0 = 0,1$ fixo. Os símbolos correspondem aos resultados da integração da Eq. (2-33), com média sobre 10^6 trajetórias.

Com relação à dependência em L , observa-se que $1/\langle t \rangle$ decresce com o aumento de L . Isso ocorre porque o TMPP cresce com L , indicando que os tempos individuais de chegada também aumentam. No entanto, esses tempos não contribuem significativamente para $\langle 1/t \rangle$, que tende a uma constante para grandes valores de L . Essa dicotomia refere-se ao fato de que, para grandes valores de L , as duas medidas de eficiência capturam aspectos distintos do processo. À medida que longos tempos de busca se tornam mais prováveis, $1/\langle t \rangle$ continua sensível a esses eventos raros, enquanto $\langle 1/t \rangle$ é dominada pelos tempos curtos. Para ambas as medidas, o caso $h < 0$ (maior difusividade próxima ao alvo) permite um melhor desempenho.

4.2

Eficiência de busca sob interpretações arbitrárias

Resgatamos a equação de Fokker-Planck retrógrada (para Q) que engloba todas as interpretações do PDH, que é

$$\frac{\partial}{\partial t} Q(x_0, t) = D(x_0)^{\frac{A}{2}} \frac{\partial}{\partial x_0} \left\{ D(x_0)^{1-\frac{A}{2}} \frac{\partial}{\partial x_0} Q(x_0, t) \right\}, \quad (4-17)$$

relembrando que $Q(x_0, t)$ é a probabilidade de sobrevivência e x_0 a posição inicial.

4.2.1

TMPP para $D(x)$ arbitrário

A partir da Eq. (4-17), podemos obter TMPP, ou seja, $\langle t \rangle$, que tem a forma de

$$\begin{aligned} \langle t \rangle &= \int_0^L D(x'')^{-\frac{A}{2}} dx'' \int_0^{x_0} D(x')^{-1+\frac{A}{2}} dx' \\ &\quad - \int_0^{x_0} D(x'')^{-1+\frac{A}{2}} \int_0^{x''} D(x')^{-\frac{A}{2}} dx' dx'', \end{aligned} \quad (4-18)$$

cuja derivação pode ser encontrada em C.3. A partir da Eq. (4-18), é possível calcular $1/\langle t \rangle$ para todas as interpretações do PDH. No caso $A = 1$ (Stratonovich), para $\langle t \rangle$, recuperamos a Eq. (4-9). Com essa expressão geral para o TMPP, podemos estudar as implicações das interpretações de Itô e anti-Itô.

Considerando $x_0 = L$ na Eq. (4-18), para $A = 0$ e $A = 2$, temos

$$\langle t \rangle_{A=0} = \int_0^L \frac{L-x}{D(x)} dx = \int_0^L \frac{x'}{D(L-x')} dx' \quad (4-19)$$

e

$$\langle t \rangle_{A=2} = \int_0^L \frac{x}{D(x)} dx. \quad (4-20)$$

Primeiramente, observamos que, diferente do caso em Stratonovich ($A = 1$), os integrandos nas Eqs. (4-19) e (4-20) não dependem apenas de D . Isso significa que a insensibilidade à ordenação da heterogeneidade, observada para o TMPP quando $A = 1$ e $x_0 = L$, é quebrada para outras interpretações do PDH. Isto implica que o formato do perfil é relevante, e não apenas a distribuição dos valores no domínio acessível.

Além disso, observa-se que as interpretações de Itô e anti-Itô resultam em valores iguais de TMPP quando o perfil é simétrico em relação a $L/2$, quando $x_0 = L$. Ou seja, a reflexão do perfil de heterogeneidade $D(x) \leftrightarrow D(L-x)$ emula o caráter antecipativo de Itô ($A = 0$) e o não-antecipativo de anti-Itô ($A = 2$) na integração estocástica. Esse efeito de simetria é ilustrado na Fig. 4.4(a), utilizando o perfil linear $D(x) = 1 + h(2x/L - 1)$, que é monotônico na região acessível $[0, L]$, e fixando $x_0 = L$. Entretanto, note que essa simetria não se mantém se $x_0 < L$, como pode ser visto na Fig. 4.4(b). Resultados qualitativamente semelhantes são obtidos para perfis não-lineares.

É importante notar que essa simetria de troca já está presente na equação de Langevin (2-33). De fato, se utilizarmos o Lema de Itô para a mudança linear de variáveis $x = L - \bar{x}$, junto com a troca $A = 2 - \bar{A}$, a equação de Langevin permanece a mesma. Contudo, a simetria observada emerge apenas quando a posição inicial está na fronteira refletora $x_0 = L$. Assim, comportamentos

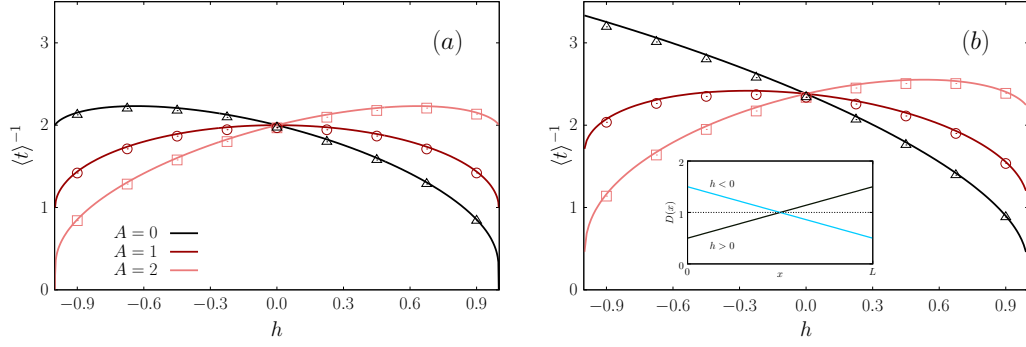


Figura 4.4: Eficiência $\langle t \rangle^{-1}$, obtida a partir da Eq. (4-18) (linhas sólidas) e de simulações estocásticas (símbolos), para o perfil de difusividade $D(x) = 1 + h(2x/L - 1)$ (mostrado no painel (b)), para diferentes valores de A , fixando $L = 1$, e (a) $x_0 = 1$ e (b) $x_0 = 0.6$. Observe no painel (a) que, como $x_0 = L$, trocar $x \leftrightarrow L - x$ é equivalente a trocar o parâmetro de interpretação A : $0 \leftrightarrow 2$, enquanto essa simetria é quebrada se $x_0 < L$, como ilustrado no painel (b).

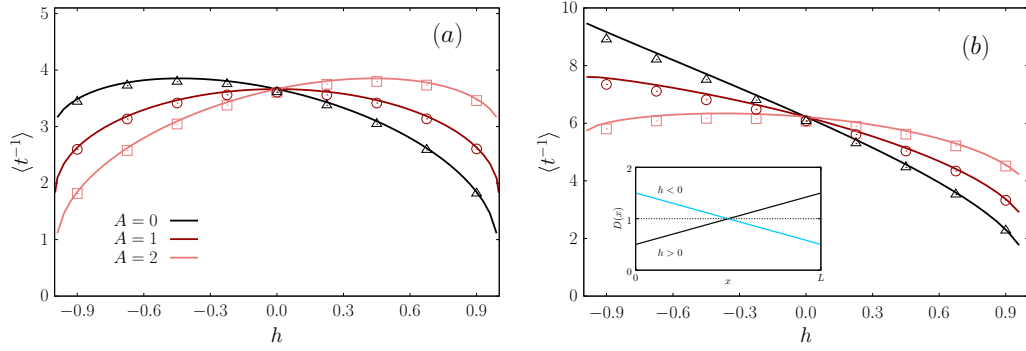


Figura 4.5: Eficiência $\langle t^{-1} \rangle$ obtida a partir da Eq. (4-21) (linhas sólidas) e de simulações estocásticas (símbolos), com o mesmo perfil de difusividade e parâmetros utilizados na Fig. 4.4.

semelhantes são esperados para $\langle 1/t \rangle$, como visto para o perfil linear na Fig. 4.5, que será discutido na próxima seção.

Outra implicação importante dos resultados para $x_0 = L$ é que, considerando a interpretação de Stratonovich o caminhante tem melhor desempenho de busca em meios homogêneos. Já para $A \neq 1$ existe um perfil heterogêneo que otimiza a busca.

Por fim, observamos que, quando o perfil aumenta com a distância a partir do alvo ($h > 0$), a eficiência aumenta com maiores valores de A . O contrário ocorre para um perfil decrescente ($h < 0$). Este efeito já foi observado e explicado para domínios não limitados no capítulo anterior. Diferentemente, quando $A = 1$, o formato do perfil não é relevante, mas apenas a distribuição dos valores. Portanto, os resultados para dado h coincidem com aqueles para $-h$.

4.2.2

Eficiência de busca $\langle 1/t \rangle$ para uma família especial de perfis $D(x)$

Embora os próximos cálculos possam ser prontamente estendidos para a família de perfis de forma potência $D(x) = (ax + b)^\alpha$, com $ax + b > 0$ para $x \in [0, L]$ e $\alpha < 2$, desenvolveremos explicitamente o caso linear, fixando $\alpha = 1$, o que facilita a obtenção de exemplos ilustrativos com expressões analiticamente mais simples.

Partindo da Eq. (4-17), em C.4 obtemos a DTPP no espaço de Laplace

$$\tilde{\varphi}(s) = \frac{(ax_0 + b)^{\frac{\gamma}{2}}}{b^{\frac{\gamma}{2}}} \frac{I_{\gamma-1}[\xi(s, L)] K_\gamma[\xi(s, x_0)] + K_{\gamma-1}[\xi(s, L)] I_\gamma[\xi(s, x_0)]}{I_{\gamma-1}[\xi(s, L)] K_\gamma[\xi(s, 0)] + K_{\gamma-1}[\xi(s, L)] I_\gamma[\xi(s, 0)]}, \quad (4-21)$$

onde $\gamma = A/2$ e $\xi(s, x_0) = 2\sqrt{s(ax_0 + b)}/a$.

Então, podemos calcular $\langle 1/t \rangle$ por integração numérica da equação $\langle 1/t \rangle = \int_0^\infty \tilde{\varphi}(s) ds$. Os resultados, comparados com simulações de Langevin, são mostrados na Fig. 4.5 para o perfil linear com valor médio unitário, $D(x) = 1 + h(2x/L - 1)$. Note que as simetrias e características principais discutidas para $1/\langle t \rangle$, quando $x_0 = L$, também se mantêm para $\langle 1/t \rangle$.

4.3

Conclusão do capítulo

Calculamos e comparamos duas medidas padrão de eficiência para o problema de busca aleatória em um intervalo unidimensional limitado, onde o coeficiente de difusão depende da posição.

O primeiro passo foi considerar um perfil geral $D(x)$ sob a interpretação de Stratonovich ($A = 1$), para a qual discutimos as semelhanças e diferenças entre ambas as medidas de eficiência. Uma característica relevante comum é que ambas não dependem da sequência de valores de $D(x)$, pois a dependência com o perfil de difusividade ocorre apenas por meio da integral y de uma função de $D(x)$. Características particulares emergem quando $x_0 = L$ (busca iniciada na parede refletora), isto é, mostramos que (i) perfis heterogêneos são menos eficientes que o perfil homogêneo com a mesma difusividade média e (ii) há uma proporcionalidade entre ambas as medidas, válida independentemente do perfil $D(x)$.

Para uma interpretação geral da integração estocástica, caracterizada pelo parâmetro A , obtivemos resultados para $1/\langle t \rangle$, válidos para qualquer $D(x)$. Como consequência importante, destaca-se a propriedade de simetria que surge quando $x_0 = L$, ou seja, a troca $D(x) \leftrightarrow D(L - x)$ gera os

mesmos resultados ao trocar o parâmetro de interpretação A : $0 \leftrightarrow 2$. Essa simetria também emerge para a medida de eficiência $\langle 1/t \rangle$, para a qual conseguimos obter uma expressão analítica para escolhas particulares de $D(x)$, como o perfil de difusividade do tipo potência, entre os quais desenvolvemos explicitamente o caso linear, abrangendo ambientes com mobilidade crescente ou decrescente em função da distância ao alvo, bem como o caso homogêneo. Além disso, em contraste com o caso $A = 1$, no qual o perfil homogêneo, com a mesma difusividade média, proporciona maior eficiência de busca que perfis heterogêneos, para $A \neq 1$, ambientes heterogêneos podem aprimorar a eficiência de atingir o alvo. Outra característica geral é que aumentar A favorece a busca quando a difusividade cresce com a distância ao alvo, e a prejudica no caso contrário. Ademais, esse efeito não é exclusivo de um formato específico do perfil de difusividade, nem da posição inicial, mas é determinado pelo caráter monotônico do perfil.

5

Busca aleatória sujeita a reposicionamento estocástico em meios heterogêneos

Neste capítulo, abordamos o problema da busca com reposicionamento estocástico (RE) para a posição inicial em um ambiente unidimensional, limitado por uma fronteira refletora, com coeficiente de difusão dependente da posição, $D(x)$. Esses reposicionamentos ocorrem em intervalos de tempo aleatórios, distribuídos exponencialmente com taxa r . Nos concentramos apenas no TMPP a partir de x_0 até um alvo localizado na origem.

Iniciamos com o caso de um perfil de difusividade linear, para o qual derivamos resultados analíticos e os comparamos com simulações numéricas. Essa análise nos esclarece o papel da heterogeneidade, caracterizada por $D(x)$ e pelo parâmetro A , no desempenho da busca com reposicionamento estocástico.

Em seguida, tratamos o caso geral, para perfis arbitrários de $D(x)$ e diferentes interpretações do ruído. Para esses casos, obtemos expressões fechadas do TMPP na interpretação de Stratonovich, além de aproximações assintóticas para valores arbitrários de A . Esses resultados permitem discutir o impacto de perfis não monotônicos na eficiência da busca aleatória com reposicionamento estocástico. Ao final discutimos algumas extensões, como a inclusão de duas fronteiras absorventes e reposicionamentos para posições arbitrárias.

5.1

O modelo

Para descrever a dinâmica do caminhante, consideramos que, a cada intervalo de tempo Δt , com probabilidade $1 - r\Delta t$, ele segue uma dinâmica de Langevin, enquanto com probabilidade $r\Delta t$, é reposicionado instantaneamente para uma posição fixa x_r . Assim, a evolução da posição do caminhante é descrita como

$$x(t + dt) = \begin{cases} \stackrel{1-r\Delta t}{=} & x(t) + \sqrt{2D(x^*)\Delta t} \eta(t), \\ \stackrel{r\Delta t}{=} & x_r. \end{cases} \quad (5-1)$$

Como estamos tratando de uma equação em tempo discreto, $\eta(t)$ representa um ruído gaussiano discreto, com média nula, $\langle \eta(t) \rangle = 0$, e correlação temporal $\langle \eta(t)\eta(t') \rangle = \delta_{t,t'}$. O termo x^* no argumento do coeficiente de difusão $D(\cdot)$ indica que a interpretação para o ruído multiplicativo ainda não foi especificada (podendo ser $x^* = [(2 - A)x(t + dt) + Ax(t)]/2$, com $A \in [0, 2]$).

Mesmo neste caso podemos reescrever a Eq. (5-1) numa forma equivalente do tipo Itô em que as demais interpretações estão englobadas através da adição de um termo de força,

$$x(t + \Delta t) = \begin{cases} \stackrel{1-r\Delta t}{=} & x + \frac{2-A}{2}D'(x) + \sqrt{2D(x)\Delta t}\eta(t) \\ \stackrel{r\Delta t}{=} & x_r. \end{cases} \quad (5-2)$$

Consideramos que o alvo está localizado em $x_t = 0$ (representado por uma fronteira absorvente), enquanto fixamos uma fronteira refletora em $x = L$.

A EFP associada ao processo da Eq. (5-2) é obtida no Apêndice D.1.1 e tem a forma de

$$\frac{\partial}{\partial t}p(x, t|x_0) = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ D(x)^{1-\frac{A}{2}} \frac{\partial}{\partial x} [D(x)^{\frac{A}{2}} p(x, t|x_0)] \right\} - rp(x, t|x_0) + r\delta(x - x_r), \quad (5-3)$$

onde $x_0, x_r \in (0, L]$, com as condições de fronteira $p(0, t|x_0) = 0$ e $\frac{\partial}{\partial x}p(x, t|x_0)|_L = 0$. O primeiro termo do lado direito da Eq. (5-3), corresponde à dispersão difusiva heterogênea. Os dois últimos termos descrevem, respectivamente, a perda de probabilidade devido ao reposicionamento estocástico a partir de x e o ganho correspondente na posição $x = x_r$.

Neste capítulo nos concentramos no estudo do TMPP. Para isso usamos a mesma metodologia dos capítulos anteriores. Primeiramente, consideramos a equação retrógrada para a probabilidade de sobrevivência

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}Q(x_0, t) &= D(x_0)^{\frac{A}{2}} \frac{\partial}{\partial x_0} \left\{ D(x_0)^{1-\frac{A}{2}} \frac{\partial}{\partial x_0} Q(x_0, t) \right\} \\ &+ rQ(x_r, t) - rQ(x_0, t), \end{aligned} \quad (5-4)$$

onde $Q(x_0, t) = \int_0^L p(x, t|x_0) dx$, e $p(x, t|x_0)$ é a densidade de probabilidade que satisfaz a equação de EFP retrógrada com reposicionamento estocástico, derivada no Apêndice D.1.2. Aplicando a transformada de Laplace à Eq. (5-4) e utilizando $T(x_0) = \tilde{Q}(x_0, s \rightarrow 0)^1$ de acordo com a Eq. (2-65), obtemos

$$D(x_0)^{\frac{A}{2}} \left[D(x_0)^{1-\frac{A}{2}} T'(x_0) \right]' + rT(x_r) - rT(x_0) = -1. \quad (5-5)$$

Essa equação diferencial ordinária, mais as condições de contorno, será o ponto de partida para nossas derivações analíticas dos TMPP.

5.2

Perfis de difusividade linear com interpretações arbitrárias

Como ponto de partida, analisamos uma classe simples de perfis de difusividade, que permite tratamento analítico para qualquer interpretação do ruído multiplicativo: o perfil linear

$$D(x) = D_0 + \alpha(x - L/2), \quad (5-6)$$

¹Por conveniência adotamos a definição $T(x_0) \equiv \langle t \rangle_{x_0}$.

onde α é um parâmetro real restrito à condição $|\alpha| < 2D_0/L$, que garante positividade de $D(x)$, e nível médio de difusividade igual a D_0 para todos os valores de α .

Iniciamos considerando o perfil da Eq. (5-6) na Eq. (5-5). Aplicando a mudança de variáveis definida na Eq. (2-55), $y(x) = \int_0^x D(z)^{-1/2} dz$, que no caso da Eq. (5-6), assume a forma explícita de

$$y(x) = \frac{2}{\alpha} \left(\sqrt{D_0 + \alpha[x - L/2]} - \sqrt{D_0 - \alpha L/2} \right), \quad (5-7)$$

onde $\lambda = 2\sqrt{D_0 - \alpha L/2}/\alpha$, resultando em

$$T''(y_0) + \frac{1-A}{y_0 + \lambda} T'(y_0) + rT(y_r) - rT(y_0) = -1, \quad (5-8)$$

onde as derivadas são em relação a y_0 , com $y_0 = y(x_0)$ e $y_r = y(x_r)$.

A resolução detalhada da Eq. (5-8) é mostrada no Apêndice D.2. Consideramos a condição absorvente para retratar a posição do alvo em $x = 0$, e também a condição refletora em $x = L$ que delimita o domínio da busca. Sob estas condições a solução particular da Eq. (5-8) torna-se

$$T(y_0) = \frac{\left(\frac{z_t}{z_r}\right)^{\frac{A}{2}} U_A(z_t, z_L) - \left(\frac{z_0}{z_r}\right)^{\frac{A}{2}} U_A(z_0, z_L)}{rU_A(z_r, z_L)}, \quad (5-9)$$

onde, usando a mesma notação utilizada na Eq. (5-8), definimos $z_\sigma \equiv \sqrt{r}(y_\sigma + \lambda)$, $y_\sigma = y(x_\sigma)$, com $\sigma \in \{0, r, t, L\}$, e $x_L \equiv L$, e

$$U_A(v, w) \equiv K_{\frac{A}{2}}(v) I_{\frac{A-2}{2}}(w) + I_{\frac{A}{2}}(v) K_{\frac{A-2}{2}}(w), \quad (5-10)$$

sendo I e K as funções de Bessel modificadas.

Note que, no limite $\alpha \rightarrow 0$, $y(x) = x/\sqrt{D_0}$ e λ tende ao infinito, recuperando o resultado TMPP no caso homogêneo [82], que é

$$T(x_0) = \frac{\cosh\left[\sqrt{r/D_0} L\right] - \cosh\left[\sqrt{r/D_0} (x_0 - L)\right]}{r \cosh\left[\sqrt{r/D_0} (L - x_r)\right]}. \quad (5-11)$$

A previsão teórica de T em função da taxa de reposicionamento r , de acordo com a Eq. (5-9) é representada na Fig. 5.1(a). Analisamos duas posições de reposicionamento x_0 (lembrando que $x_r = x_0$). Também são consideradas duas diferentes inclinações α para perfil linear de difusividades: decrescente com $\alpha = -1.5$, crescente com $\alpha = 1.5$ e o caso constante ($\alpha = 0$). Além disso, fixamos $L = 1$ e $D_0 = 1$ neste e nos demais exemplos. A figura mostra dois diferentes regimes. Para posições de reposicionamento x_0 suficientemente grandes (por exemplo, $x_0 = 0.7$ na figura), o TMPP cresce monotonicamente em função r para qualquer α . Portanto, nesse caso, o RE não favorece a busca. Na segunda situação, ilustrada para $x_0 = 0.4$, o TMPP apresenta

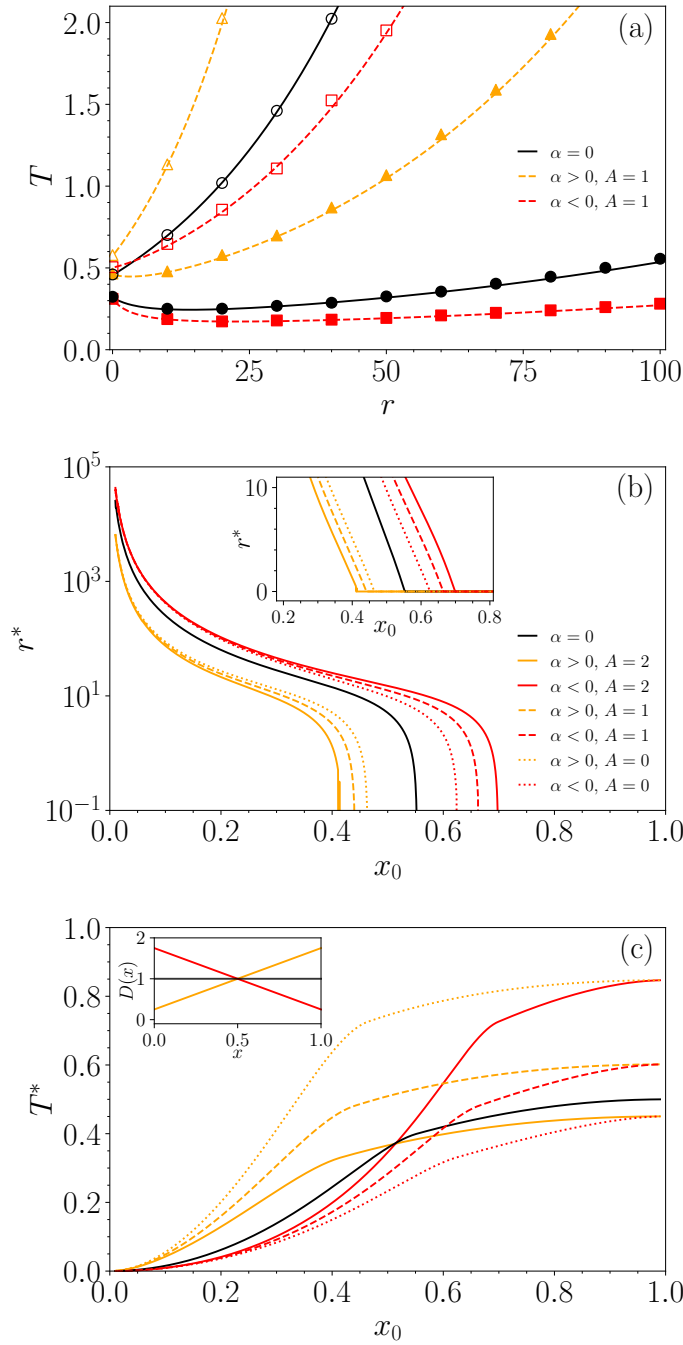


Figura 5.1: **Difusividade linear** $D(x) = 1 + \alpha(x - 1/2)$, com $\alpha = +1.5$ (laranja claro), $\alpha = -1.5$ (vermelho), e o caso homogêneo $\alpha = 0$ (preto), representados no detalhe de (c). (a) T em função de r , fornecido pela Eq. (5-9), para $x_0 = 0.4$ (símbolos preenchidos) e $x_0 = 0.7$ (vazados), considerando a interpretação de Stratonovich ($A = 1$). (b) Taxa de reposicionamento ótima r^* (que minimiza o TMPP) vs. x_0 , para diferentes valores de A indicados na legenda. O gráfico em detalhe mostra uma ampliação da região crítica em escala linear. (c) TMPP ótimo correspondente T^* vs. x_0 . Em todos os casos $x_r = x_0$. Os símbolos correspondem a simulações estocásticas (média sobre 10^4 trajetórias) da Eq. (5-2), e as linhas aos resultados teóricos.

um valor mínimo, T^* . Isso indica a existência de um valor ótimo não nulo de r , denotado por r^* , que minimiza o TMPP. Esses dois regimes também ocorrem para $A \neq 1$, assim como no caso homogêneo $\alpha = 0$ (linha preta), conforme reportado anteriormente [82, 83]. Entretanto, como veremos, o tipo de heterogeneidade, determinada por $D(x)$ e A , afeta tanto o valor crítico de x_0 quanto o ponto ótimo (r^*, T^*) .

Na Fig. 5.1(b), mostramos r^* em função de x_0 , para os mesmos perfis, com $A = 0, 1, 2$. O intervalo de x_0 onde $r^* \neq 0$ indica o regime onde a taxa r^* minimiza o TMPP, enquanto $r^* = 0$ corresponde ao regime onde o reposicionamento prejudica a busca. Note que, para $\alpha < 0$ (linhas vermelhas), o valor crítico x_c , que separa os regimes, é maior do que no caso homogêneo (linha preta) com mesmo nível médio D_0 . Quanto maior o valor de A (quanto mais antecipante é o processo), mais acentuada é essa diferença, implicando que o intervalo de posições iniciais x_0 em que o RE reduz o tempo médio de busca é ampliado em comparação ao caso homogêneo. Portanto, o reposicionamento permanece eficaz para posições iniciais mais distantes do alvo em comparação ao caso homogêneo. Para perfis crescentes ($\alpha > 0$, linhas laranja claro), observa-se o oposto.

Os tempos ótimos correspondentes, T^* em função de x_0 , são mostrados na Fig. 5.1(c). Nota-se que, no caso mais antecipante ($A = 0$, anti-Itô), os tempos ótimos são menores para perfis decrescentes e maiores para perfis crescentes, ao longo de toda a faixa de x_0 .

Para outras interpretações (valores de A), ocorrem cruzamentos entre os tempos ótimos para valores intermediários de x_0 . Para pequenos valores de x_0 , os menores valores de TMPP ocorrem para perfis decrescentes ($\alpha < 0$, linhas vermelhas), sendo os tempos ainda menores quanto mais antecipante é o processo. Tendência oposta é observada para perfis crescentes ($\alpha > 0$, linhas laranja claro).

No caso particular em que $x_0 = 0.5$, os resultados para os pares (α, A) e $(-\alpha, 2 - A)$ coincidem. Em particular, para $A = 1$ (interpretação de Stratonovich), os TMPP são iguais para perfis crescentes e decrescentes com mesmo $|\alpha|$. Estas simetrias são as mesmas reportadas no capítulo anterior (Seção 4.2.1), uma vez que o r^* é sempre zero para $x_0 = L$.

Vale mencionar que as características destacadas acima não são exclusivas do caso linear, mas os resultados são qualitativamente semelhantes para outras formas monotônicas, como $D(x) = D_0 + d \cos(\pi x/L)$ ou simplesmente a forma de dois níveis $D(x) = D_0 \pm d$, para $x \leq L/2$ (não mostrado).

5.3

Difusividade arbitrária $D(x)$

5.3.1

Cenário de Stratonovich ($A = 1$)

Utilizando a interpretação de Stratonovich, é possível obter uma expressão fechada para o TMPP para perfis arbitrários, como segue. Fixando $A = 1$, a Eq. (5-5) torna-se

$$\sqrt{D(x_0)} \left[\sqrt{D(x_0)} T'(x_0) \right]' + rT(x_r) - rT(x_0) = -1. \quad (5-12)$$

Aplicando também, neste caso, a mudança de variável dada por Eq. (2-55), obtemos

$$T''(y_0) - rT(y_0) + rT(y_r) = -1, \quad (5-13)$$

cuja solução geral tem a forma autoconsistente

$$T(y_0) = \frac{1}{r} + T(y_r) + \sum_{m=\pm} c_m \exp [m \sqrt{r} y_0], \quad (5-14)$$

onde c_{\pm} são determinados pelas condições de contorno. Assim, obtemos a expressão explícita

$$T(y_0) = \frac{\cosh [\sqrt{r}(y_L - y_t)] - \cosh [\sqrt{r}(y_L - y_0)]}{r \cosh [\sqrt{r}(y_L - y_r)]}, \quad (5-15)$$

que, para perfis homogêneos, recupera a Eq. (5-11).

Para explorar os efeitos de perfis não monotônicos, consideramos a família

$$D(x) = D_0 + d \cos(k\pi x/L), \quad (5-16)$$

onde $|d| < D_0$ para garantir positividade, e k é um número inteiro para preservar o nível médio média D_0 .

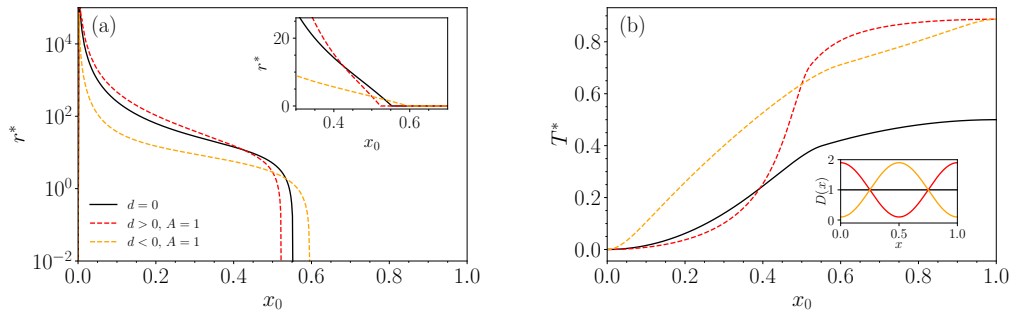


Figura 5.2: **Difusividade oscilante** $D(x) = 1 + d \cos(2\pi x)$, com $A = 1$, representada no detalhe do painel inferior. (a) Taxa de reposicionamento ótima, r^* , e (b) correspondente TMPP ótimo, T^* , em função de x_0 , para $d = 0.9$ (laranja), $d = -0.9$ (vermelho) e $d = 0$ (preto). O detalhe em (a) é uma ampliação ao redor do valor crítico de x_0 . Em todos os casos, $x_r = x_0$.

As quantidades ótimas r^* e T^* em função de x_0 são apresentadas na Fig. 5.2, para $k = 2$, $D_0 = 1$, $L = 1$. De forma geral, para posições de

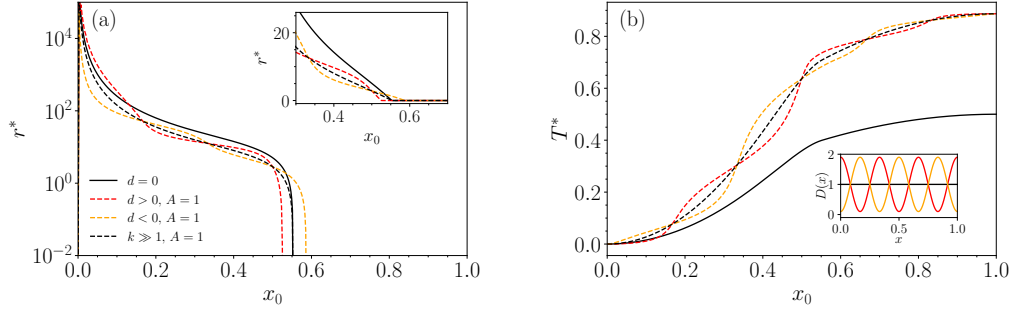


Figura 5.3: **Difusividade oscilante** $D(x) = 1 + d\cos(6\pi x)$, com $A = 1$, representada no detalhe do painel inferior. (a) Taxa de reposicionamento ótima, r^* , e (b) correspondente TMPP ótimo, T^* , em função de x_0 , para $d = 0.9$ (laranja), $d = -0.9$ (vermelho) e $d = 0$ (linha preta sólida). A linha preta tracejada corresponde ao limite $k \gg 1$, insensível ao sinal de d . O gráfico em detalhe em (a) é uma ampliação ao redor do valor crítico de x_0 . Em todos os casos, $x_r = x_0$.

reposicionamento pequenas x_0 , observamos tendências semelhantes às dos casos monotônicos, dependendo da inclinação do perfil de difusividade nas proximidades do alvo. Essa tendência ainda se mantém, mas mais próxima do alvo, se aumentarmos o número de oscilações, como ilustrado na Fig. 5.3, para $k = 6$. Para perfis altamente oscilantes ($k \gg 1$), o TMPP é maior do que no caso homogêneo para qualquer posição de reinício x_0 , como pode ser visto pelas linhas tracejadas na Fig. 5.3. Portanto, ao menos no cenário de Stratonovich, a busca, mesmo quando o RE é benéfico, é menos eficiente do que no caso homogêneo.

5.3.2

Valor Arbitrário de A

Quando consideramos interpretações distintas da de Stratonovich, não foi possível derivar uma fórmula explícita para o TMPP que se aplique a perfis genéricos. Entretanto, obtemos expressões aproximadas válidas nos limites assintóticos da taxa r de reposicionamento. Ou seja, valores grandes ou pequenos de r . Essas expressões serão úteis para determinar o tipo de regime. Especificamente, elas ajudarão a verificar se existe um valor $r \neq 0$ para o qual o TMPP é mais curto em comparação ao caso sem reposicionamento. A aproximação pra grandes valores de r é obtida usando o método WKB [84,85]. Já aproximação válida para valores de pequenos de r é derivada usando teoria de perturbações convencional [86]. Abaixo resumimos as expressões explícitas encontradas em cada caso, enquanto os detalhes das derivações são deixados para o Apêndice D.3.

O bom desempenho dessas aproximações é ilustrado na Fig. 5.4, compa-

ramos os resultado provenientes das aproximações com um caso em que temos a solução exata. Escolhemos o caso do perfil linear derivado na seção 5.2.

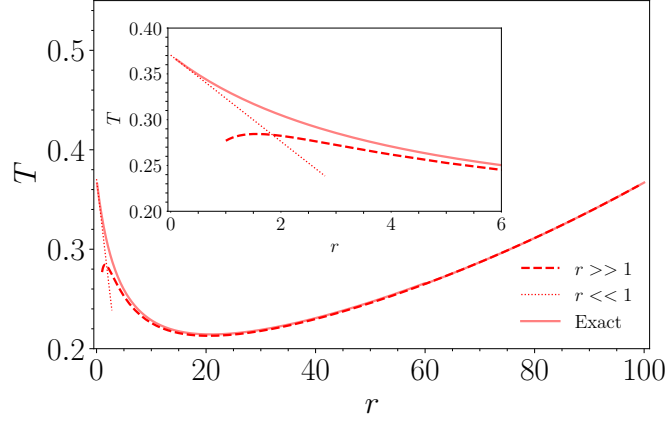


Figura 5.4: **Perfil linear** $D(x) = 1 - 0.9(x - 1/2)$, sob a interpretação de Itô ($A = 2$). TMPP T em função da taxa de reposicionamento r . As aproximações assintóticas, para pequenos valores de r dadas pela Eq. (5-18), até primeira ordem, e para grandes valores de r dadas pela Eq. (5-17), são mostradas, em bom acordo com a solução exata dada pela Eq. (5-9). $x_r = x_0 = 0.4$. O gráfico em detalhe mostra uma ampliação da região de transição entre as duas soluções.

5.3.2.1

Aproximação para valores de r grandes

Para valores grandes de r , encontramos (detalhes se encontram na Seção D.3.1 do Apêndice D):

$$\begin{aligned} T^l(x_0) &\approx \frac{e^{\sqrt{r}y_r}}{rD(x_r)^{\frac{A-1}{4}}} \left[\frac{D(x_t)^{\frac{A-1}{4}}}{e^{\sqrt{r}y_t}} - \frac{D(x_0)^{\frac{A-1}{4}}}{e^{\sqrt{r}y_0}} \right], \\ &\approx \left(\frac{D(x_t)}{D(x_r)} \right)^{\frac{A-1}{4}} \frac{e^{\sqrt{r}(y_r - y_t)}}{r}, \end{aligned} \quad (5-17)$$

onde, como na Eq. (5-9), $y_\sigma \equiv y(x_\sigma)$, e $\sigma \in \{0, r, t\}$. Note que neste limite de r grande, o TMPP não depende de L , e também a informação sobre a posição inicial, contida em y_0 , é perdida, claro, se $x_0 \neq x_r$. De acordo com Eq. (5-17), para r suficientemente grande, o TMPP aumenta com r , já que em nosso caso $y_r > y_t = 0$.

Percebe-se, quanto mais rápida a taxa de reposicionamento, maior a probabilidade de que um reposicionamento ocorra antes que o caminhante consiga atravessar a distância de x_r até o alvo em $x_t = 0$. Portanto, atingir o alvo se torna um evento cada vez mais raro, e o tempo total esperado para o encontro aumenta.

A Eq. (5-17) permite quantificar essa intuição, prevendo que a lei de crescimento do TMPP com r é uma exponencial estirada com expoente $1/2$, com um fator de correção $1/r$, isto é, $\exp([y_r - y_t]r^{1/2})/r$, que é muito maior que o tempo médio entre reposicionamentos, $1/r$.

Além disso, a expressão do TMPP, dominada por esta exponencial estirada, é independente do perfil de difusividade, sendo portanto a mesma que no caso homogêneo.

A heterogeneidade afeta apenas o pré-fator na Eq. (5-17), que depende do valor de A e da razão das difusividades em x_t e x_r . Para $A = 1$, o pré-fator é unitário como no caso homogêneo, enquanto para os casos de Itô e anti-Itô surgem fatores inversos.

5.3.2.2

Aproximação para valores de r pequenos

Para valores pequenos de taxa r consideramos uma solução em forma de série perturbativa

$$T^s(x_0) = \sum_{n=0}^{\infty} r^n T_n(x_0). \quad (5-18)$$

A solução de ordem zero na Eq. (5-18), solução não perturbada ($r = 0$), é a mesma derivada no capítulo anterior (Eq. (4-18)), ou seja

$$\begin{aligned} T_0(x_0) &= \int_0^L D(x'')^{-\frac{A}{2}} dx'' \int_0^{x_0} D(x')^{-1+\frac{A}{2}} dx' \\ &- \int_0^{x_0} D(x'')^{-1+\frac{A}{2}} \int_0^{x''} D(x')^{-\frac{A}{2}} dx' dx''. \end{aligned} \quad (5-19)$$

Os termos de ordem superior da série perturbativa são obtidos por meio da seguinte equação recursiva

$$T_n(x_0) = \int_0^L G(x|\xi) D(\xi)^{-\frac{A}{2}} [T_{n-1}(\xi) - T_{n-1}(x_r)] d\xi, \quad (5-20)$$

Em que $G(x|\xi)$ possui a forma de

$$G(x_0|\xi) = - \begin{cases} \int_0^{x_0} D(x')^{\frac{A}{2}-1} dx' & \text{se } 0 \leq x_0 \leq \xi, \\ \int_0^{\xi} D(x')^{\frac{A}{2}-1} dx' & \text{se } \xi \leq x_0 \leq L, \end{cases}, \quad (5-21)$$

que deve satisfazer as condições de contorno do problema.

5.3.2.3

Aplicação dos resultados assintóticos

Utilizamos as aproximações desenvolvidas para investigar um perfil não-linear e não monotônico. Escolhemos o perfil do tipo cosseno $D(x) = D_0 + d \cos(2\pi x/L)$, considerado anteriormente no cenário de Stratonovich. Agora estamos aptos a explorar este caso para as demais interpretações. Os resultados

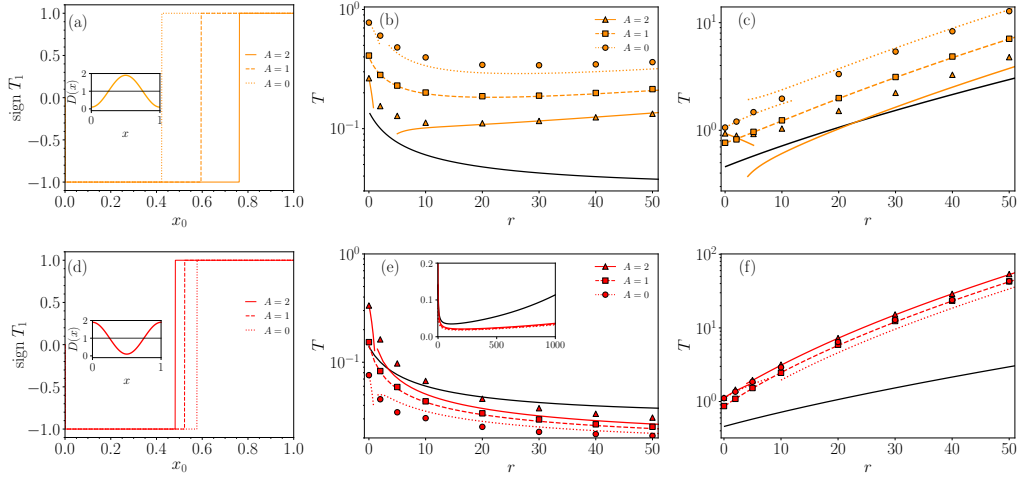


Figura 5.5: (a) e (d): Diagramas de fases dados por $\text{sign}(T_1) \equiv dT/dr|_{r=0}$ em função de x_0 , para a difusividade oscilante $D(x) = 1 + d \cos(2\pi x)$ com $d = -0.9$ (laranja) e $d = 0.9$ (vermelho). Os perfis estão representados nos respectivos insets. TMPP em função de r para $(d, x_0) = (-0.9, 0.15)$ (b) e $(-0.9, 0.71)$ (c), $(d, x_0) = (0.9, 0.15)$ (e) e $(0.9, 0.71)$ (f). As curvas para $d = 0$ (preto) também são plotadas. As aproximações para r pequeno, dadas pela Eq. (5-18), e para r grande, dadas pela Eq. (5-17), também são mostradas. Em (e), o detalhe é uma ampliação do gráfico principal, para exibir os mínimos. Em todos os casos, $x_r = x_0$. Os símbolos correspondem a simulações estocásticas da Eq. (5-2).

são mostrados na Fig. 5.5. Nos limites esperados, as aproximações assintóticas descrevem bem o TMPP. As linhas contínuas para pequenos valores de r representam a aproximação (linear) dada pela Eq. (5-18), enquanto para grandes valores r a aproximação dada pela Eq. (5-17) é mostrada. Ambas as curvas acompanham os resultados obtidos através das simulações numéricas da Eq. (5-2).

A partir da aproximação para pequenos valores de r , podemos extrair a quantidade

$$\text{sign } T_1 \equiv \text{sign} \left[\left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=0} \right], \quad (5-22)$$

onde T_1 é o segundo coeficiente da expansão Eq. (5-18). Como esse coeficiente corresponde à derivada do TMPP em $r = 0$, ele permite distinguir entre os regimes de busca: se for positivo, não há valor ótimo de r ; se for negativo, existe um valor ótimo [87]. Isto é garantido pois T diverge no limite $r \rightarrow \infty$, indicando que o caminhante é reposicionado frequentemente para a posição x_r nunca alcançando o alvo.

Em relação ao impacto do RE, observe que, novamente, ambos os perfis possuem a mesma média e exploram os mesmos valores de difusividade. No entanto, o perfil com maior difusividade próximo ao alvo (linhas vermelhas) é aquele para o qual o reposicionamento é mais efetivo. Como mostrado na, Fig. 5.5(e), caso em que o tempo T é reduzido para valores suficientemente

grandes de r , em comparação ao cenário homogêneo. Por outro lado, no perfil com baixa difusividade perto do alvo, o tempo T — mesmo no mínimo — se torna maior do que no caso homogêneo (Fig. 5.5(b)).

5.4

Outras condições

Nesta seção, analisamos outros casos de interesse: duas fronteiras absorventes, posição de reposicionamento diferente da posição inicial ($x_r \neq x_0$) e o limite de um domínio semi-infinito.

5.4.1

Duas fronteiras absorventes

Consideramos também a situação com duas fronteiras absorventes, em $x = 0$ e $x = L$. Esse cenário corresponde, por exemplo, à presença de um único alvo em um domínio de tamanho L com condições de contorno periódicas — ou seja, um anel. Sem perda de generalidade, podemos posicionar o alvo na origem, $x = 0$.

Também pode representar a busca na região entre dois alvos separados por L , ou simplesmente um problema de saída de uma região de comprimento L .

Aplicando as condições de fronteira absorventes à solução geral dada pela Eq. (D-19), obtemos no Apêndice D.4

$$T(y_0) = \frac{\mathcal{W}_A(z_0, z_t) - \mathcal{W}_A(z_0, z_L) + \mathcal{W}_A(z_t, z_L)}{r (\mathcal{W}_A(z_r, z_L) - \mathcal{W}_A(z_r, z_t))}, \quad (5-23)$$

onde

$$\mathcal{W}_A(u, v) = (uv)^{\frac{A}{2}} \left(K_{\frac{A}{2}}(u) I_{\frac{A}{2}}(v) - I_{\frac{A}{2}}(u) K_{\frac{A}{2}}(v) \right). \quad (5-24)$$

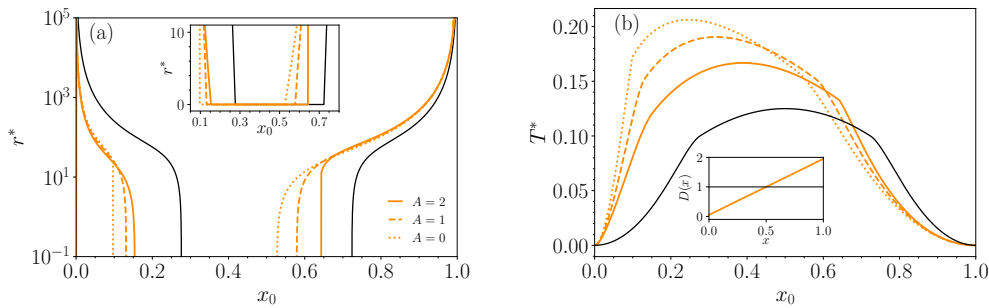


Figura 5.6: **Difusividade linear** $D(x) = 1 + 1.9(x - 1/2)$, ilustrada no painel inferior (gráfico em detalhe), com fronteiras absorventes em $x = 0$ e $x = L = 1$. (a) Taxa ótima de reposicionamento r^* em função de x_0 , para diferentes valores de A indicados na legenda. (b) TMPP ótimo correspondente T^* versus x_0 . O caso homogêneo também é plotado para comparação (linhas pretas). Em todos os casos, $x_r = x_0$.

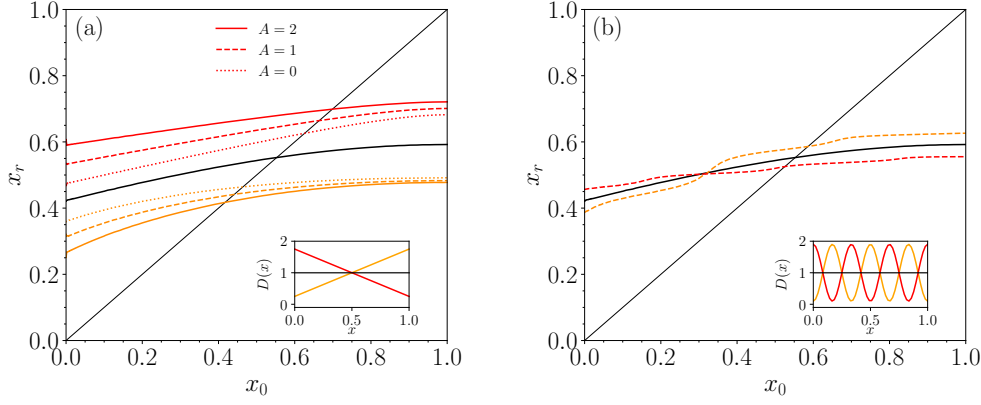


Figura 5.7: Linhas críticas. (a) **Difusividade linear** $D(x) = 1 + \alpha(x - 1/2)$, com $\alpha = 1.5$ (laranja) e $\alpha = -1.5$ (vermelho), para diferentes valores de A indicados na legenda. (b) **Difusividade oscilante** $D(x) = 1 \pm d \cos(6\pi x)$, para $d = 0.9$ (laranja), $d = -0.9$ (vermelho) e caso homogêneo $d = 0$ (preto), representados nos respectivos *insets*, para a prescrição de Stratonovich $A = 1$. A região abaixo de cada curva corresponde a $dT/dr|_{r=0} < 0$; caso contrário, $dT/dr|_{r=0} > 0$. Aqui $x_r = x_0$.

Como verificação, observamos que, no caso homogêneo, a Eq. (5-23) se reduz a

$$T(x_0) = \frac{2 \sinh \left[\sqrt{r/4D_0}(L - x_0) \right] \sinh \left[\sqrt{r/4D_0} x_0 \right]}{r \cosh \left[\sqrt{r/4D_0}(L - 2x_r) \right]}, \quad (5-25)$$

em concordância com a Ref. [88].

Na Fig. 5.6, apresentamos r^* e T^* em função de x_0 para o caso linear com duas fronteiras absorventes. Devido à simetria dos limites, consideramos apenas $\alpha > 0$ nesse caso. Note que, na vizinhança de cada fronteira (posição do alvo), observamos o mesmo comportamento encontrado no caso linear com uma única fronteira absorvente (Fig. 5.1). Este comportamento depende se a difusividade é mínima ou máxima nos respectivos alvos.

5.4.1.1

Reposicionamento genérico $x_r \neq x_0$

Na Fig. 5.7, representamos as curvas críticas que separam as regiões onde $dT/dr|_{r=0} < 0$ (abaixo da curva), para as quais o RE é favorável, e onde $dT/dr|_{r=0} > 0$ (acima da curva), para as quais o RE é desfavorável. As curvas foram determinadas utilizando a quantidade definida na Eq. (5-22), calculada para diferentes valores de x_0 e x_r para os diversos perfis mostrados nos gráficos em detalhe nas respectivas figuras. Observamos uma forte dependência da posição de reinício x_r , enquanto a dependência da posição inicial x_0 é fraca, exceto para valores muito pequenos de x_0 . De fato, para pequenos x_0 , muitas

trajetórias podem alcançar o alvo antes do primeiro reposicionamento; caso contrário, a memória da condição inicial é rapidamente apagada, uma vez que r^* é grande. A fraca dependência em x_0 também é observada no caso homogêneo [82].

5.4.2

Limite $L \rightarrow \infty$

Vale a pena discutir nossos resultados no limite de um ambiente semi-infinito ($L \rightarrow \infty$), em comparação com resultados anteriores da literatura. Em ambientes homogêneos, para L suficientemente grande, existe um valor ótimo de r para qualquer x_0 [83]. Para meios heterogêneos, no cenário semi-infinito ($L \rightarrow \infty$), o TMPP diverge quando $r = 0$ (conforme o Cap. 2). Por outro lado, o TMPP é finito para $r > 0$.

Curiosamente a aproximação para grandes valores de r , Eq. (5-17), que é independente de L , possui a mesma forma de quando fazemos o limite de L grande. Como esperado, para difusividade homogênea e alvo na origem (isto é, $y_t = 0$), a Eq. (5-17) recupera o resultado conhecido [32]:

$$T(x_0) = \frac{1}{r} \left(e^{\sqrt{r/D_0}x_r} - e^{\sqrt{r/D_0}(x_r-x_0)} \right), \quad (5-26)$$

que é exato para qualquer r , não necessariamente grande. A Eq. (5-17) também fornece a solução exata para qualquer r , dentro da interpretação de Stratonovich ($A = 1$), conforme discutido na Seção 5.3.1.

Além disso, para $A = 1$, a Eq. (5-17) também pode ser obtida como

$$T(x_0) = \lim_{s \rightarrow 0} \tilde{Q}(x_0, s), \quad (5-27)$$

com [34]

$$\tilde{Q}(x_0, s) = \frac{\tilde{Q}_0(x_r, r + s)}{1 - r\tilde{Q}_0(x_r, r + s)}, \quad (5-28)$$

obtida utilizando a teoria de renovação, onde

$$\tilde{Q}_0(x_0, s) = \frac{1}{s} \left(1 - e^{\sqrt{s}y(x_0)} \right) \quad (5-29)$$

é a probabilidade de sobrevivência calculada sem o RE, obtida no Capítulo 2.

5.5

Conclusão do capítulo

Estudamos o desempenho de buscas aleatórias sujeitas a RE em ambientes com difusividade dependente do espaço. Para um $D(x)$ arbitrário, obtivemos expressões analíticas para o TMPP (T), que são exatas no contexto da interpretação de Stratonovich, e aproximadas para outras prescrições. Também obtivemos resultados analíticos para formas particulares de $D(x)$, como a difusividade linear, para qualquer interpretação. Além disso, discutimos di-

versas extensões, como a situação de duas fronteiras absorventes, o limite de domínio semi-infinito, e a possibilidade de $x_r \neq x_0$.

Dependendo das características da heterogeneidade, o RE pode ser efetivo para posições de reposicionamento mais afastadas do alvo do que no caso homogêneo, e o tempo médio T para atingir o alvo pode ser reduzido. O tempo T é tipicamente menor que no caso homogêneo para difusividades que decaem afastando-se do alvo (i.e., maior difusividade próxima ao alvo), com efeitos mais fortes quanto mais antecipante é o processo. O oposto ocorre para difusividades que aumentam com a distância ao alvo. Além disso, dentro do contexto de Stratonovich, perfis altamente oscilatórios degradam a eficiência, o efeito é acentuado quanto maior o número de onda.

6

Tamanho crítico do habitat para uma população de indivíduos sujeitos a reposicionamentos estocásticos

Neste capítulo, aplicamos a dinâmica de reposicionamentos estocásticos a um problema clássico da dinâmica de populações: a determinação do tamanho mínimo de um fragmento do habitat, cercado por um ambiente hostil, necessário para garantir a sobrevivência de uma população.

Motivados por situações em que indivíduos se deslocam esporadicamente a uma localização ou estado preferencial no ambiente, consideramos o RE como uma forma de representar tais comportamentos. Estes deslocamentos podem ocorrer, por exemplo, em interações entre presa e predador [39], que podem ser modeladas através do RE [32, 34]. Além disso, o RE pode refletir eventos ecológicos ocasionais, como migração, recolonização ou estratégias de forrageamento com base central (*central place foraging*) [89], bem como a busca por recursos localizados, como fontes de água ou afloramentos de sal. Ademais, a presença de uma localização preferencial de retorno está alinhada com observações de campo, que mostram que os indivíduos frequentemente se concentram em determinadas regiões do habitat [90].

Em particular, o RE pode permitir que o indivíduo supere escassez temporária de recursos ou condições adversas, o que pode reduzir a quantidade de espaço necessária para a sobrevivência populacional. O modelo proposto nos ajuda a entender como retornos intermitentes em locais específicos afetam o tamanho mínimo para sobrevivência, produzindo resultados mais próximos dos comportamentos observados em ecossistemas reais e podendo auxiliar no desenvolvimento de estratégias voltadas à conservação de espécies.

Neste panorama examinamos dois cenários. Primeiramente, analisamos a situação em que as condições externas são extremas, onde a população decai com uma taxa de extinção infinita, $a_{\text{ex}} \rightarrow \infty$, o que pode ser modelado efetivamente por meio de condições de contorno absorventes. O segundo caso, mais geral, consideramos $a_{\text{ex}} > 0$ arbitrário. Em ambos os cenários, exploramos como a variação na taxa e na posição de reposicionamento influencia o tamanho do habitat no qual ocorre a transição para extinção da população, fornecendo uma compreensão do papel da dinâmica de reposicionamento na viabilidade populacional.

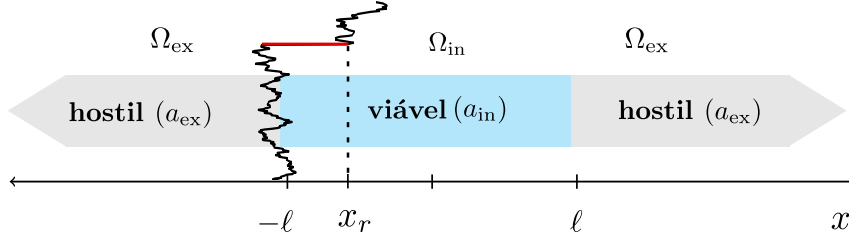


Figura 6.1: Representação esquemática do cenário espacial unidimensional (1D) utilizado aqui. Na região viável, chamada de mancha ou habitat, a taxa de crescimento é positiva. Essa região se estende de $x = -\ell$ até $x = \ell$. Na região ao redor, há condições hostis, implicando uma taxa de crescimento negativa. A trajetória (tempo na direção vertical) mostra um passeio aleatório (preto) com reinicialização para a posição x_r (vermelho).

6.1 Modelo

Em uma dimensão, definimos uma região de boa qualidade, denominada habitat, como o intervalo $\Omega_{\text{in}} = (-\ell, \ell)$. No habitat, a população cresce a uma taxa a_{in} . Esta região é cercada por um ambiente hostil (o conjunto complementar à Ω_{in} , denotado por Ω_{ex}), onde a taxa de crescimento é negativa, $-a_{\text{ex}}$, como mostrado na Fig. 6.1. Os indivíduos obedecem a uma dinâmica difusiva e estão sujeitos a reposicionamentos aleatórios e esporádicos para uma posição fixa x_r , que pode estar dentro ou fora do habitat. Inicialmente, consideramos que os indivíduos podem ser reposicionados a partir de qualquer ponto da região $\Omega = \Omega_{\text{in}} \cup \Omega_{\text{ex}}$. Em seguida, analisamos o caso em que os indivíduos são reposicionados apenas a partir da região hostil Ω_{ex} .

Usando uma descrição discreta baseada em agentes, consideramos que o movimento de um indivíduo i segue um movimento Browniano, suplementado por reposicionamentos estocásticos. A dinâmica é descrita matematicamente como

$$x^{(i)}(t + \Delta t) = \begin{cases} 1-r\Delta t & x^{(i)}(t) + \sqrt{2D\Delta t}\eta^{(i)}(t), \\ r\Delta t & x_r, \end{cases} \quad (6-1)$$

onde D é a difusividade constante em todo o espaço, e $\eta^{(i)}$ é um ruído gaussiano de média zero e variância unitária. Para o crescimento populacional, consideramos as reações

$$\begin{aligned} i &\xrightarrow{a_{\text{in}}} i + i', & \text{se } x \in \Omega_{\text{in}}, \\ i &\xrightarrow{a_{\text{ex}}} \emptyset, & \text{se } x \in \Omega_{\text{ex}}, \end{aligned} \quad (6-2)$$

onde i' é um novo indivíduo e \emptyset denota a aniquilação. Além disso, consideramos que em $t = 0$ todos os agentes estão posicionados em $x_0 \in \Omega_{\text{in}}$.

Alternativamente, a dinâmica pode ser descrita no limite contínuo. Nesse caso, utilizamos a densidade de indivíduos por unidade de comprimento, denotada por $u(x, t; x_0)$. Essa função representa o número de indivíduos por unidade de comprimento na posição x e no tempo t , dado que a posição inicial é x_0 . A dinâmica de difusão com RE é semelhante à que utilizamos no Capítulo 4. Neste modelo, além dessa estratégia de movimento, acrescentamos um termo de crescimento populacional. Assim, a densidade $u(x, t; x_0)$ passa a ser governada pela equação de reação-difusão, dada por

$$\begin{aligned} \partial_t u &= \partial_x^2 u + (1 - \varepsilon r)u + rN_\Omega \delta(x - x_r), & \text{se } x \in \Omega_{\text{in}}, \\ \partial_t u &= \partial_x^2 u - (a + r)u + rN_\Omega \delta(x - x_r), & \text{se } x \in \Omega_{\text{ex}}, \end{aligned} \quad (6-3)$$

onde $u \equiv u(x, t; x_0)$, $N_\Omega(t, x_0) = \int_\Omega u dx$ e $\varepsilon = 1$ (ou 0) se Ω contém (ou não contém) Ω_{in} . Além disso, reescalamos as variáveis e parâmetros como segue: $t a_{\text{in}} \rightarrow t$, $x \sqrt{a_{\text{in}}/D} \rightarrow x$, $a_{\text{ex}}/a_{\text{in}} \rightarrow a$ ($a_{\text{in}} \rightarrow 1$), e $r/a_{\text{in}} \rightarrow r$. Note que na Eq. (6-3), o termo com a delta de Dirac desaparece em uma das equações, já que x_r pertence a apenas uma das duas regiões.

Na equação para $x \in \Omega_{\text{in}}$, o primeiro termo representa a difusão. O segundo termo corresponde ao crescimento populacional com taxa unitária na região viável. Esse termo também inclui a redução devida ao reposicionamento dos indivíduos. Por fim, o último termo representa a contribuição do reposicionamento em $x = x_r$. Essa contribuição é diferente de zero apenas quando $x_r \in \Omega_{\text{in}}$.

Já para equação com $x \in \Omega_{\text{ex}}$, o primeiro termo novamente representa a difusão. O segundo termo diz respeito ao decaimento populacional devido à taxa negativa $-a$, juntamente com a remoção dos indivíduos causada pelo reposicionamento. Por fim, o terceiro termo representa a contribuição do reposicionamento em x_r . Essa contribuição é diferente de zero apenas quando $x_r \in \Omega_{\text{ex}}$.

Observe que definimos o problema como linear desde o início, desconsiderando termos de capacidade de suporte, no entanto, nossa abordagem pode ser estendida para cenários mais gerais (como os que envolvem crescimento logístico). Como estamos principalmente interessados na condição crítica próxima à qual a densidade populacional é muito baixa, a capacidade de suporte não tem efeito. Além disso, nosso modelo também corresponde a análise linear do caso em que é considerado um termo logístico.

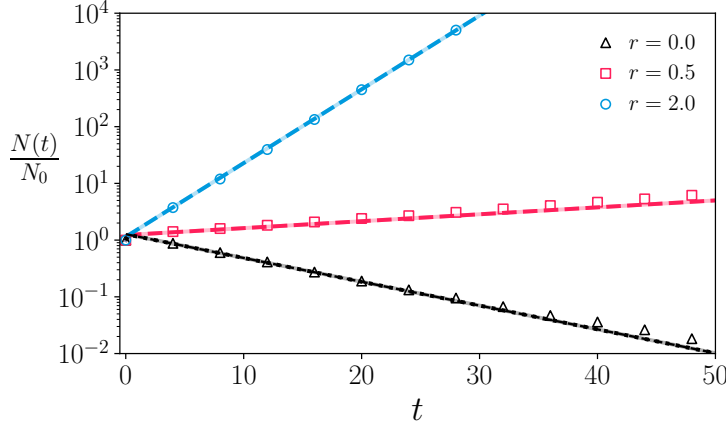


Figura 6.2: Evolução temporal do tamanho total da população $N(t)$ normalizado pelos valores iniciais N_0 , quando a meia largura é $\ell = 1.5$, $x_0 = 0$ e $x_r = 0$ para da taxa de reposicionamento r indicados na legenda. Os símbolos referem-se à média de 10^5 simulações estocásticas das Eqs. (6-1) e (6-2) com $dt = 10^{-5}$. As linhas sólidas finas são obtidas por inversão numérica da Eq. (E-4) [1], enquanto as linhas tracejadas correspondem à aproximação de tempos longos fornecida por Eq. (6-6). No caso particular $r = 0$, também mostramos (linha pontilhada) a expressão analítica conhecida [2,3], e $s_M = s_0 = 1 - (\pi/3)^2$ (ver Apêndice E.1). Para $r > 0$, os valores de s_M são obtidos numericamente e são $s_{0.5} \approx 0.0281$, $s_{2.0} \approx 0.2993$.

6.2

Ambiente externo totalmente hostil

Inicialmente assumimos que, fora de região de boa qualidade, isto é, $|x| > \ell$, $a_{\text{ex}} \rightarrow \infty$. Esta condição expressa que os indivíduos, ao saírem do habitat, são imediatamente aniquilados. Assim, apenas a primeira das duas equações em Eq. (6-3) é considerada. Nesta condição, $\varepsilon = 1$. Agora, a região externa é representada por condições de contorno absorventes em $x = \pm\ell$.

Escrevendo a equação mestra retrógrada associada a esse processo [5,32], temos

$$\partial_t u(x_0) = \partial_{x_0}^2 u(x_0) + (1 - r)u(x_0) + ru(x_r), \quad (6-4)$$

onde denotamos $u(y) \equiv u(x, t; y)$. Integrando então sobre x , obtemos a seguinte equação diferencial para o número total de indivíduos $N(t, x_0)$,

$$\partial_t N(t, x_0) = \partial_{x_0}^2 N(t, x_0) + (1 - r)N(t, x_0) + rN(t, x_r). \quad (6-5)$$

Os detalhes para a resolução destas equações são fornecidos no material suplementar do capítulo (Apêndice E). Para tempos suficientemente longos, obtemos

$$N(t) \approx \mathcal{N}(x_0, x_r, r, \ell) e^{s_M t}, \quad (6-6)$$

onde \mathcal{N} é uma constante que depende de todos os parâmetros do modelo, e s_M é a taxa dominante de crescimento de um espectro, que depende de ℓ , r e x_r (ver Apêndice E.1 para detalhes dos cálculos).

Na Fig. 6.2, mostramos a evolução de $N(t)$ para diferentes valores da taxa de reposicionamento r . Os símbolos correspondem a simulações numéricas do processo estocástico definido pelas Eqs. (6-1), enquanto as linhas tracejadas são dadas pela previsão teórica fornecida pela Eq. (6-6). As previsões teóricas estão em bom acordo com os resultados das simulações. No caso da Fig. 6.2 ($\ell = 1.5$ e $x_r = 0$, que, na ausência do RE, é levemente subcrítico), observamos que a população decai, e o mesmo acontece para taxas baixas de reposicionamento. Por outro lado, para taxas de RE acima de um limiar crítico ($r^* \simeq 0.4$), a população apresenta crescimento.

6.2.1

Tamanho crítico

Na condição crítica que separa os regimes de persistência e declínio da população, emerge um estado estacionário correspondente a $s_M = 0$. O tamanho crítico pode ser obtido diretamente resolvendo a forma estacionária da Eq. (6-5) (ver Apêndice E.2), levando a

$$\ell_c(r, x_r) = \frac{\arccos(r \cos[x_r \sqrt{1-r}])}{\sqrt{1-r}}, \quad (6-7)$$

onde (e ao longo do capítulo) as funções são definidas para argumento complexo. O caso especial (ressonante) $r = 1$, para o qual a taxa de reposicionamento é igual à taxa de crescimento, pode ser obtido tomando o limite $r \rightarrow 1$, o que dá $\ell_c(1, x_r) = \sqrt{2 + x_r^2}$. Fixando $r = 0$, recuperamos o resultado conhecido na ausência de reposicionamento: $\ell_c = \pi/2$.

Com relação ao efeito da taxa r sobre o tamanho crítico para uma posição de reposicionamento x_r fixa, apresentamos na Fig. 6.3(a) um gráfico de ℓ_c em função de r para diferentes valores de x_r . Neste caso, três comportamentos diferentes podem ser observados.

Em particular, quando $x_r = 0$, a Eq. (6-7) torna-se

$$\ell_c(r, 0) = \frac{\arccos(r)}{\sqrt{1-r}}, \quad (6-8)$$

que decai com r como mostrado na Fig. 6.3(a). No limite $r \rightarrow \infty$, temos $\ell_c \rightarrow 0$. O mesmo ocorre para outras posições de reposicionamento x_r desde que o declive $\partial \ell_c / \partial r|_{r=0} = \pi/4 - \cos(x_r) < 0$, ou seja, para $|x_r| < x_r^* = \arccos(\pi/4) \simeq 0.667$. Esse intervalo define uma região central no entorno de $x = 0$, na qual qualquer reposicionamento favorece a sobrevivência, permitindo que o habitat necessário para sustentar a população seja menor do que no caso sem o reposicionamento.

Para x_r suficientemente distante do centro, o RE não pode reduzir o tamanho crítico independentemente do valor de r . De fato, ℓ_c primeiro aumenta

com r , atinge um máximo e depois decai até $\ell_c(\infty, x_r)$, que é igual a $|x_r|$, de acordo com a Eq. (6-7). Portanto, para $\ell_c(r = 0) \equiv \ell_c^* < |x_r|$, a redução do habitat não pode ocorrer.

Na região intermediária $x_r^* < |x_r| < \ell_c^*$, embora ℓ_c aumente inicialmente com r , depois de atingir um máximo, ela decai abaixo do valor sem RE, denotado por ℓ_c^* . Isso ocorre desde que a taxa de reposicionamento seja suficientemente alta, ou seja, acima da taxa limite r^* , na qual $\ell_c(r^*, x_r) = \ell_c^*$. Isso corresponde ao ponto onde cada curva na Fig. 6.3(a) intercepta a linha horizontal tracejada. O limiar r^* é mostrado em função de $|x_r|$ na Fig. 6.3(b)

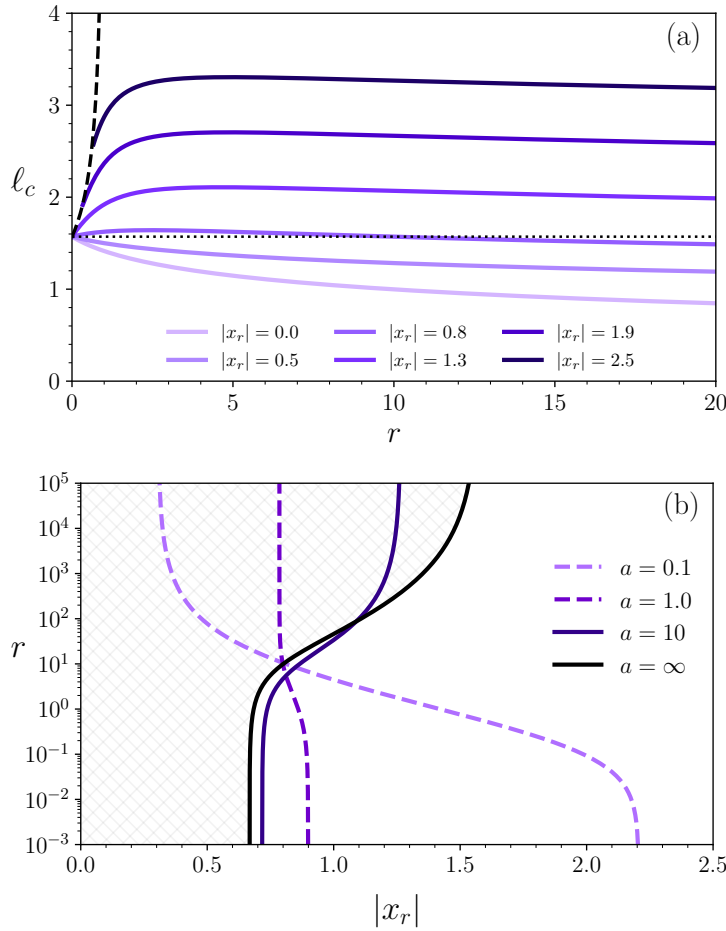


Figura 6.3: (a) Meia largura crítica ℓ_c como função da taxa de reposicionamento r para diferentes valores de $|x_r|$ indicados na legenda. As linhas sólidas são dadas pela Eq. (6-7). A linha pontilhada horizontal corresponde ao valor crítico na ausência de reposicionamento ($r = 0$). A linha tracejada é dada pela Eq. (6-9). (b) Diagrama no espaço de parâmetros (x_r, r) mostrando a região (duplamente hachurada) onde o reposicionamento reduz o tamanho crítico da região. A linha preta sólida corresponde ao r^* finito para o qual $\ell_c(r, x_r) = \ell_c(0, x_r)$ como função de x_r . Para além de $|x_r| = \ell_c^* = \pi/2$, a redução do tamanho crítico não pode ser alcançada para nenhum valor de r . Como explicado na Seção 6.3, as linhas coloridas representam r^* vs. x_r para valores finitos de a .

(linha preta sólida para $x_r \in [x_r^*, \ell_c^*]$). Indica que, para evitar a extinção, são necessárias taxas altas quando x_r está localizado fora de uma região central ao redor do centro do habitat. A região hachurada duplamente é onde o mecanismo de reposicionamento, caracterizado por r e $x_r \in \Omega_{\text{in}}$, permite uma redução no tamanho do habitat.

Destacamos que um comportamento não monotônico, como observado na Fig. 6.3 para x_r suficientemente distante das bordas, lembra o visto em cenários onde uma força elástica guia os indivíduos em direção a uma área específica conhecida como área de vida (*home range*) [58]. Nesse caso, o aumento da rigidez elástica da força desempenha um papel semelhante ao aumento da taxa de reposicionamento do nosso problema. Para forças fracas, esse efeito pode aumentar ou diminuir o tamanho crítico da região. No entanto, quando a amplitude da força é suficientemente forte, os indivíduos tendem a se concentrar na posição de retorno.

Por fim, ressaltamos que, quando a posição de reposicionamento está fora da região, $\ell_c(r, x_r) < |x_r|$, então, de acordo com a Eq. (6-3), o efeito do RE é reduzir efetivamente a taxa de reprodução de $a_{\text{in}} = 1 \rightarrow 1 - r$. Isso ainda permite a sobrevivência para $r < 1$ com um tamanho crítico maior dado pela expressão sem RE com $a_{\text{in}} = 1 - r$:

$$\bar{\ell}_c(r) = \frac{\pi}{2\sqrt{1-r}}, \quad (6-9)$$

naturalmente, independente da posição de reposicionamento, já que x_r está na região absorvente. Essa condição só pode ocorrer para $|x_r| > \bar{\ell}_c(0) = \pi/2$. De fato, ao fixar $\bar{\ell}_c(r) = \ell_c(r, x_r)$, a solução não nula é $r = 1 - (\pi/[2x_r])^2$, mostrada na Fig. 6.3(a) como uma curva tracejada.

Em resumo:

- (i) Para $|x_r| < x_r^*$, o tamanho crítico é reduzido por RE para qualquer taxa r (isto é, $r^* = 0$).
- (ii) Para $x_r^* < |x_r| < \ell_c^*$, o tamanho crítico pode ser reduzido para taxas $r > r^* > 0$.
- (iii) Para $\ell_c(0) < |x_r|$, o tamanho crítico não pode ser reduzido para nenhum r .

6.2.2

Distribuição espacial estacionária na criticalidade

Para tempos suficientemente longos, a dominância de apenas um modo é atingida rapidamente (como observado na Fig. 6.2). Assim, podemos aproximar $u(x, t) \approx \phi(x) \exp(s_M t)$, o que, substituído na Eq. (6-3), resulta em

$$\partial_x^2 \phi + (1 - r - s_M) \phi = -r \mathcal{N} \delta(x - x_r), \quad (6-10)$$

onde $\mathcal{N} \equiv \mathcal{N}(x_0, x_r, r, \ell)$ foi definido na Eq. (E-8). A solução da Eq. (6-10) é a função de Green associada à equação de Helmholtz 1D, isto é,

$$\phi(x) = r\mathcal{N} \begin{cases} \frac{\sin[\xi_r(\ell+x)] \sin[\xi_r(\ell-x_r)]}{\xi_r \sin[2\xi_r \ell]}, & -\ell < x < x_r, \\ \frac{\sin[\xi_r(\ell-x)] \sin[\xi_r(\ell+x_r)]}{\xi_r \sin[2\xi_r \ell]}, & x_r < x < \ell, \end{cases} \quad (6-11)$$

onde $\xi_r = \sqrt{1-r-s_M}$ (ver Apêndice E.1). Esta aproximação inicial implica que o perfil espacial tende a uma forma que permanece inalterada, exceto pelo fator exponencial.

Na criticalidade, onde $\ell = \ell_c$ e $s_M = 0$, $\phi(x)$ coincide com a solução estacionária. Esses perfis estacionários teóricos são mostrados na Fig. 6.4 (linhas), para $r = 10$ (a) e $r = 0.5$ (b), e diferentes valores de x_r , em bom acordo com as simulações baseadas em agentes. Note novamente que, para posições de RE próximas ao centro (pequenos valores de $|x_r|$), o mecanismo de reposicionamento reduz o tamanho crítico do habitat. No entanto, esse efeito não é observado para posições mais próximas às bordas. Além disso, o valor estacionário da densidade populacional total, $N/(2\ell_c)$, decresce com o aumento de x_r , como ilustrado nos gráficos em detalhe.

6.2.3

Papel da distribuição inicial

Lembrando que a condição inicial considerada é uma função delta de Dirac em um ponto arbitrário x_0 na região de boa qualidade. Note também

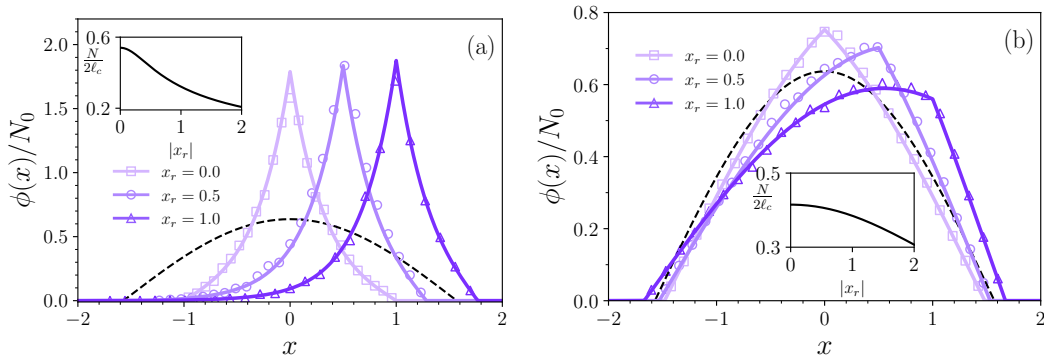


Figura 6.4: Distribuição de densidade estacionária para $r = 10$ (a) e $r = 0.5$ (b), $x_r = 0.0, 0.5$ e 1.0 , nos valores críticos do tamanho do habitat $2\ell_c$ (ver Fig. 6.3(a)). A curva tracejada corresponde ao estado estacionário para $r = 0$, apresentada para comparação. Em todos os casos, $a_{\text{ex}} \rightarrow \infty$. As linhas são fornecidas pela Eq. (6-11) e os símbolos são obtidos por simulação estocástica da Eq. (6-1) com 10^5 realizações e $dt = 10^{-5}$. Os painéis internos mostram o valor estacionário da população total por unidade de comprimento em função de $|x_r|$, quando a densidade inicial é $N_0 = 1$.

que a Eq. (6-7) para o tamanho crítico do habitat permanece independente desse ponto de concentração inicial.

Relembrando que inicialmente toda a população é concentrada na posição x_0 , essa condição equivale a uma distribuição inicial do tipo delta de Dirac centrada em x_0 . Note, também que a Eq. (6-7) para o tamanho crítico do habitat não depende do ponto inicial x_0 , diferente da número de indivíduos no estado estacionário, como veremos.

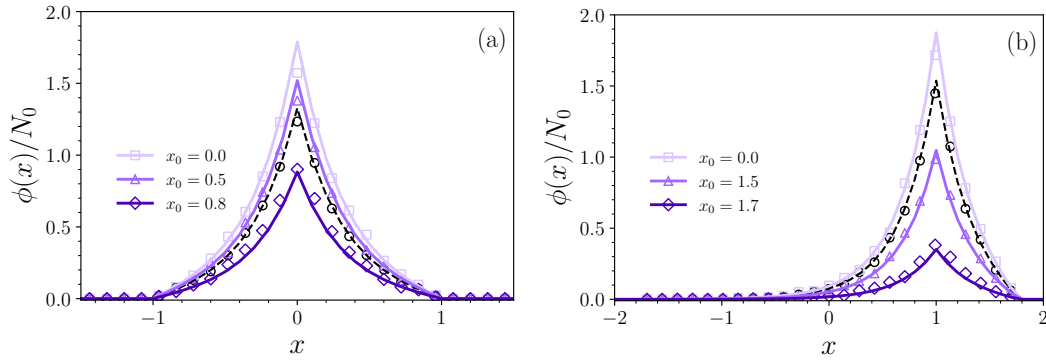


Figura 6.5: Distribuição de densidade estacionária, quando a distribuição inicial é uma delta de Dirac centrada em x_0 , para diferentes valores de x_0 indicados na legenda. Também, $r = 10$ e as posições de reposicionamento são (a) $x_r = 0$ e (b) $x_r = 1$. O caso em que a distribuição inicial é uniforme também é mostrada para comparação (linha tracejada preta).

A Fig. 6.5(a) mostra os estados estacionários resultantes de condições iniciais concentradas em diferentes pontos iniciais x_0 , com reposicionamento para $x_r = 0$ e $r = 10$. Note que a forma é invariante, mas sua altura decresce quando a posição de reposicionamento é deslocada para as bordas, como esperado devido a maiores perdas difusivas durante o transiente. O caso de distribuição inicial uniforme também é mostrado para comparação, resultando no mesmo perfil estacionário, exceto por um fator multiplicativo. Também neste caso, o tamanho crítico do habitat permanece inalterado. De fato, qualquer distribuição inicial geral pode ser representada como uma superposição contínua de funções delta de Dirac. Uma vez que equação de evolução é linearizada, então, o tamanho crítico não é afetado pela escolha da distribuição inicial, como ilustrado pelo perfil espacial estacionário que emerge da distribuição uniforme. A Fig. 6.5(b) ilustra o efeito da condição inicial para uma posição de reposicionamento fora do centro ($x_r = 1$), apresentando efeitos qualitativamente semelhantes aos do caso (a).

6.3

Ambiente parcialmente hostil

Consideramos agora cenários nos quais a região fora do habitat de tamanho 2ℓ não está completamente degradada, mas possui uma taxa de extinção finita $a \in (0, \infty)$. Também consideramos que os reposicionamentos podem ocorrer de uma certa região Ω para uma posição x_r , dentro ou fora da habitat. Analisamos dois casos de interesse, para os quais encontramos o tamanho crítico do habitat. Um deles é quando $\Omega = \mathbb{R}$, isto é, indivíduos tanto dentro quanto fora do habitat podem ser reposicionados, o que chamamos de “reposicionamento total”. Outro é quando $\Omega = \Omega_{\text{ex}}$, isto é, apenas os indivíduos na região externa podem ser realocados, o que chamamos de “reposicionamento parcial”.

6.3.1

Reposicionamento total

Agora indivíduos dentro e fora da região viável podem ser selecionados para serem reposicionados. Então, as Eqs. (6-3) tornam-se

$$\begin{aligned} u'' + (1-r)u + rN\delta(x-x_r) &= 0, & \text{se } x \in \Omega_{\text{in}}, \\ u'' - (a+r)u + rN\delta(x-x_r) &= 0, & \text{se } x \in \Omega_{\text{ex}}. \end{aligned} \quad (6-12)$$

Se $x_r \in \Omega_{\text{in}}$, isto é, se os indivíduos são realocados para a região viável, obtemos (seguindo a abordagem descrita no Apêndice E.3),

$$\ell_c(r, x_r) = \frac{1}{\sqrt{1-r}} \arccos\left(r \cos(\alpha x_r) + \sigma \sqrt{\Lambda}\right), \quad (6-13)$$

onde

$$\Lambda = (1-r) \left[\frac{1}{a+1} - \frac{r^2 \cos^2(\alpha x_r)}{a+r} \right],$$

com $\alpha = \sqrt{1-r}$ e $\sigma = \text{sign}(1-r)$.

Se $x_r \in \Omega_{\text{ex}}$, isto é, se os indivíduos são realocados para um ponto fora do habitat, então obtemos uma equação transcendental para o tamanho crítico:

$$\begin{aligned} \sin(\alpha \ell_c) \left[(a+1) r e^{\gamma \ell_c} + \alpha^2 (\gamma^2 - r) e^{\gamma x_r} \right] \\ - \alpha \gamma (\gamma^2 - r) e^{\gamma x_r} \cos(\alpha \ell_c) = 0, \end{aligned} \quad (6-14)$$

onde $\gamma = \sqrt{a+r}$.

A Fig. 6.6(a) mostra a meia largura crítica ℓ_c como função de r , para o caso especial $x_r = 0$ e diferentes valores de a . Na ausência de reposicionamentos, ambientes menos hostis (isto é, menor taxa de decaimento

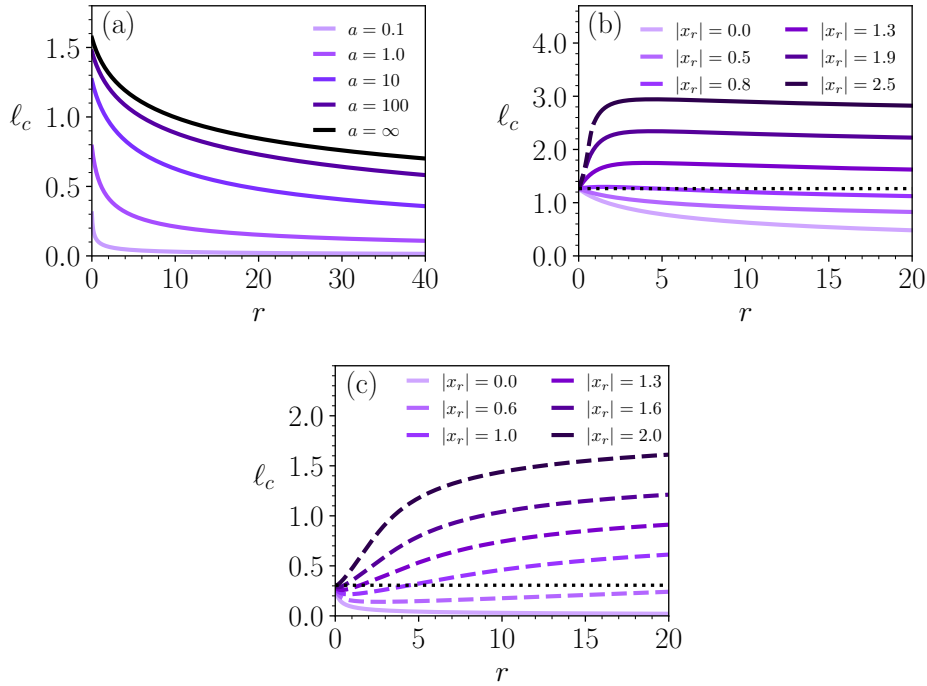


Figura 6.6: Reposicionamento a partir de qualquer local. Meia largura crítica ℓ_c como função da taxa r , (a) para diferentes valores de a quando $x_r = 0$, e para $a = 2$ (b) e $a = 0.1$ (c) para diferentes valores de $|x_r|$. Linhas contínuas são fornecidas pela Eq. (6-13), para $x_r \in \Omega_{\text{in}}$. Linhas tracejadas são obtidas resolvendo numericamente a Eq. (6-14), com $x_r \in \Omega_{\text{ex}}$. Em (b), a linha horizontal pontilhada representa a meia largura crítica na ausência de reinicialização.

a) conduzem, naturalmente, a um tamanho crítico reduzido. Quando o RE é introduzido e $x_r = 0$, então o aumento da taxa de reposicionamento r reduz monotonicamente ℓ_c , como esperado, já que os indivíduos são conduzidos com maior frequência ao ponto mais favorável. Este efeito é mais pronunciado para menores valores de a . Em particular, quando a tende a zero, o tamanho crítico também tende a zero. No limite oposto $a \rightarrow \infty$, recuperamos a curva para $|x_r| = 0$ mostrada na Fig. 6.3(a).

Para outros valores de x_r , as curvas ℓ_c vs. r podem exibir diversos comportamentos não monotônicos, como mostrado nas Figs. 6.6(b)-(c). Para $a = 2$ (b), o resultado é qualitativamente semelhante ao observado para o ambiente totalmente hostil na Fig. 6.3, com os três tipos de regime descritos ao final da Sec. 6.2.1. Ressaltamos que a linha tracejada para $|x_r| = 1.6$ foi obtida resolvendo numericamente a Eq. (6-14), que recupera a Eq. (6-9) quando $a \rightarrow \infty$. Nesse limite, o comportamento apresentado na Fig. 6.3(a) é recuperado.

Contudo, quando o ambiente é fracamente hostil (isto é, a é pequeno), comportamentos diferentes ao do ambiente totalmente hostil ocorrem, como

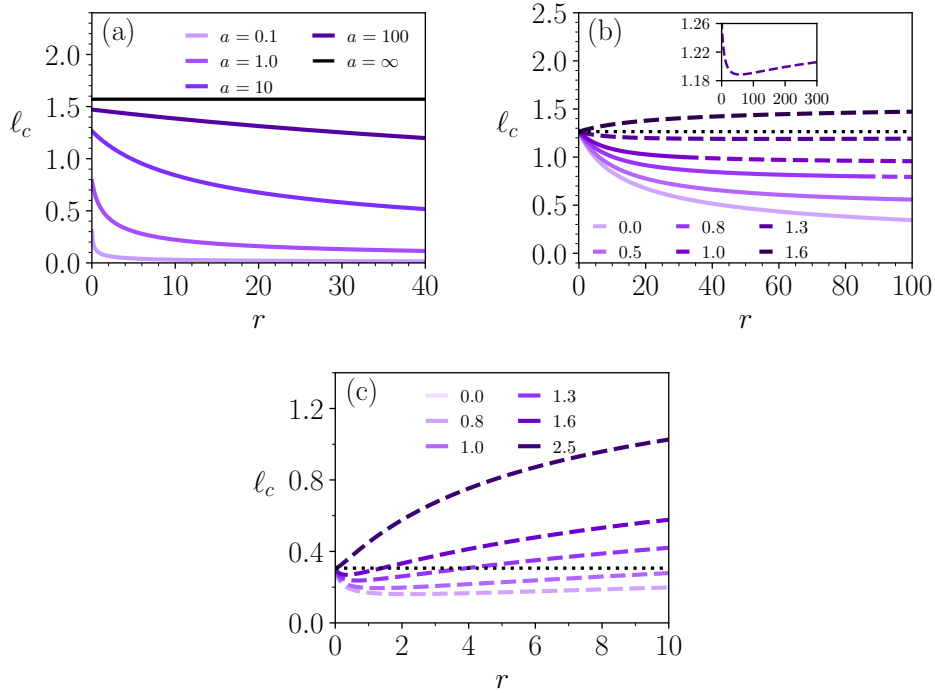


Figura 6.7: Reposicionamento apenas a partir da região externa. Meia largura crítica ℓ_c como função da taxa r , (a) para diferentes valores de a , com $x_r = 0$, para $a = 10$ (b) e $a = 0.1$ (c) com diferentes valores de $|x_r|$. Linhas contínuas são fornecidas pela Eq. (6-17), para $x_r \in \Omega_{\text{in}}$. Linhas tracejadas são obtidas resolvendo numericamente a Eq. (6-18), para $x_r \in \Omega_{\text{ex}}$. Em (b), a linha horizontal pontilhada representa a meia largura crítica na ausência de reinicialização. O painel interno mostra um detalhe para o caso $x_r = 1.3$.

ilustrado na Fig. 6.6(c), para $a = 0.1$. Tipicamente, para x_r suficientemente pequeno, há uma taxa ótima (finita) de reposicionamento, que produz um tamanho crítico mínimo (portanto, menor do que sem RE), para posições de reposicionamento fora do habitat (linhas tracejadas), como ilustrado para $a = 0.1$ na Fig. 6.6(c).

Este efeito pode ser qualitativamente entendido como segue. Para um ambiente altamente hostil (grandes valores de a), o reposicionamento se torna prejudicial quando a posição de retorno está longe do centro do habitat, mesmo se ainda dentro da região viável. Nesses casos, a sobrevivência exige aumento no tamanho do habitat. Diferentemente, em um ambiente fracamente hostil (pequenos valores de a), pode haver um balanço positivo de indivíduos que se beneficiam ao serem reposicionados para uma posição próxima do habitat, mesmo que para fora dela, podendo reduzir o tempo dentro da região externa. Nesse caso, a dinâmica de reposicionamento pode levar à redução do tamanho mínimo do habitat. Esse balanço envolve as escalas de tempo do reposicionamento, crescimento e difusão.

Por outro lado, se a posição de retorno está muito distante ou se a taxa de

reposicionamento torna-se muito alta, esse balanço é revertido, e um tamanho mínimo do habitat emerge nesse ponto de inflexão.

Os resultados são resumidos no diagrama da Fig. 6.3(b), onde apresentamos, para cada valor de a , a linha que delimita a região no plano dos parâmetros x_r - r , para os quais o RE reduz ℓ_c , representada por linha tracejada quando $x_r \in \Omega_{\text{ex}}$ ou por linha contínua quando $x_r \in \Omega_{\text{in}}$.

Além disso, para $a = 0.1$, distinguimos as regiões onde ocorre a redução, dependendo se x_r está dentro (duplamente hachurada) ou fora (hachurada) do habitat. A linha que delimita as duas regiões é obtida impondo $\ell_c = x_r$ na Eq. (6-13), ou alternativamente na Eq. (6-14), resultando em

$$x_r = \frac{1}{\sqrt{1-r}} \arccos \sqrt{\frac{(a+r)}{(a+1)[r+a(1-r)]}}, \quad (6-15)$$

enquanto $\ell_c < \ell_c^*$. Diagramas separados para três valores diferentes de a são exibidos no Apêndice E.4 (Fig. E.1).

6.3.2

Realocação parcial

Neste caso, apenas os indivíduos localizados na região externa Ω_{ex} são reposicionados. Assim, $\varepsilon = 0$, e a forma estacionária das Eqs. (6-3) torna-se

$$\begin{aligned} u'' + u + rN_{\Omega_{\text{ex}}} \delta(x - x_r) &= 0, & \text{se } x \in \Omega_{\text{in}}, \\ u'' - (a+r)u + rN_{\Omega_{\text{ex}}} \delta(x - x_r) &= 0, & \text{se } x \in \Omega_{\text{ex}}. \end{aligned} \quad (6-16)$$

Seguindo a mesma abordagem da Sec 6.3.1, se $x_r \in \Omega_{\text{in}}$, isto é, se os indivíduos são realocados para o habitat, então o tamanho crítico é dado por

$$\ell_c(r, x_r) = \arccos \left(\frac{r \cos x_r + \sqrt{\Lambda'}}{1 + a + r} \right), \quad (6-17)$$

onde $\Lambda' = 1 + a + r - r^2 \cos^2 x_r / (a + r)$.

Se as realocações são a partir de fora do habitat viável, isto é, $x_r \in \Omega_{\text{ex}}$, então a meia largura crítica é obtida resolvendo numericamente a equação

$$e^{\gamma x_r} (\gamma^2 - r) (\gamma \cos \ell_c - \sin \ell_c) - e^{\gamma \ell_c} \sin \ell_c = 0, \quad (6-18)$$

onde $\gamma = \sqrt{a+r}$.

A Fig. 6.7(a) mostra a meia largura crítica ℓ_c em função de r , para $x_r = 0$ e diferentes valores de a . A figura é qualitativamente semelhante à observada na Fig. 6.6(a). No entanto, neste caso, o mecanismo de reposicionamento é menos eficaz em reduzir o tamanho crítico. Isto é percebido pela queda mais lenta e pela menor razão $\ell_c^* / \ell_c(\infty, x_r)$ para o mesmo valor de a . No limite $a \rightarrow \infty$, ℓ_c torna-se independente de r , em contraste com o caso do reposicionamento

total. Note que apenas os indivíduos na região hostil são “resgatados” neste caso.

Ao variar x_r , novos comportamentos não monotônicos de ℓ_c em função de r surgem, como mostrado na Fig. 6.6(b). Mesmo quando a posição de reposicionamento está fora do habitat (linhas tracejadas), o reposicionamento pode ser benéfico. Ademais, para certos valores de x_r (fora do fragmento), existe uma taxa ótima para a qual ℓ_c é mínima (como ilustrado no inserto para $x_r = 1,3$), menor do que no caso sem reposicionamento. O surgimento desse valor ótimo pode ser entendido por argumentos semelhantes aos usados em relação aos valores ótimos na Fig. 6.6.

O panorama completo é esquematizado na Fig. 6.8, onde mostramos, para cada valor de a indicado na legenda, a curva que define a região em que o reposicionamento reduz o tamanho crítico (à esquerda da curva).

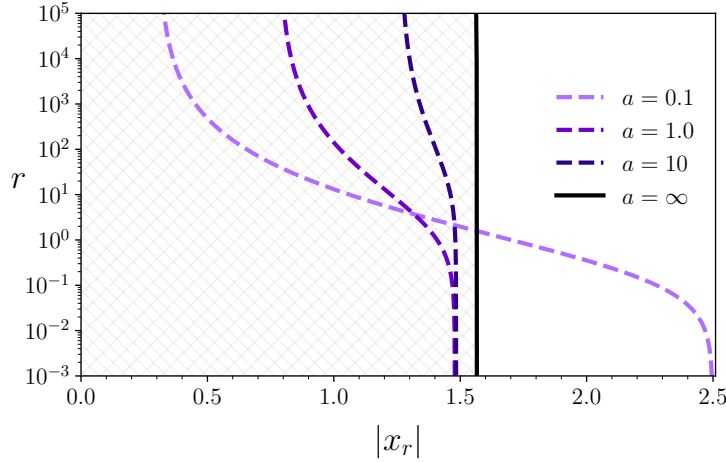


Figura 6.8: Diagrama para o reposicionamento parcial no espaço de parâmetros (x_r, r) mostrando as linhas que delimitam a região (à esquerda das curvas) onde o reposicionamento reduz o tamanho crítico do fragmento, dada pela condição $\ell_c(r, x_r) = \ell_c^*$, como na Fig. 6.3(b). No caso $a \rightarrow \infty$, a região com hachura dupla à esquerda da linha $x_r = \ell_c^* = \pi/2$ permite redução do tamanho crítico para qualquer taxa, o que ocorre para $x_r \in \Omega_{\text{in}}$. Para diferentes valores de a , é exibida a curva r^* em função de $|x_r|$.

A linha que delimita as duas regiões é obtida ao se impor $\ell_c = x_r$ na Eq. (6-17), ou alternativamente na Eq. (6-18), resultando em

$$x_r = \arccos \sqrt{\frac{(a+r)(1+a+r)}{(a+r)(a+1)^2 + r^2}}. \quad (6-19)$$

Também neste caso, diagramas para três valores de a são apresentados no Apêndice E.4 (Fig. E.1), onde distinguimos a região em que o reposicionamento diminui o tamanho crítico, para posições de reposicionamento x_r localizadas fora (hachura simples) ou dentro (hachura dupla) do habitat.

6.4

Conclusão do capítulo

Neste capítulo, estudamos os efeitos do RE no problema do tamanho crítico de um habitat, considerando que os indivíduos podem ser realocados aleatoriamente para dentro ou fora de uma região viável. Primeiramente, focamos no cenário em que um ambiente extremamente hostil é presente além das fronteiras de uma região de boa qualidade. Obtivemos uma aproximação analítica para descrever a dinâmica da população total N ao longo do tempo, fornecendo uma visão sobre o comportamento assintótico da população em tais ambientes extremos. Além disso, derivamos analiticamente uma expressão explícita para o tamanho crítico do habitat, $2\ell_c$, como função dos parâmetros da dinâmica populacional e do RE.

Em seguida, estendemos nosso estudo para abordar um cenário mais geral, no qual o ambiente fora do habitat não é totalmente letal, mas é caracterizado por uma taxa de mortalidade finita. Esse cenário é particularmente relevante para ecossistemas reais, onde os habitats frequentemente existem em um mosaico complexo de condições ambientais variadas. Elaboramos os casos em que os indivíduos podem ser realocados a partir do exterior ou de qualquer lugar, para dentro do habitat viável ou para fora dele. Em alguns casos, encontramos uma forma fechada para a expressão do tamanho crítico do habitat, enquanto em outros obtivemos equações transcendentais das quais a meia largura ℓ_c pode ser extraída numericamente.

Em alguns casos, observamos que o tamanho crítico pode diminuir com o RE, proporcionalmente com a taxa em que os reposicionamentos ocorrem. Em outros casos, dependendo de x_r , pode haver também um cenário adverso no qual há uma taxa de reposicionamento que faz com que o tamanho crítico atinja seu valor máximo. Nossos resultados analíticos permitiram identificar claramente esses regimes.

No entanto, para valores pequenos de a , existe uma taxa ótima de reposicionamento r que minimiza o valor de ℓ_c , quando os indivíduos são reiniciados para região externa. Destacamos que nossos resultados permitem identificação de dependências não monotônicas entre a taxa de RE e o tamanho crítico do habitat. Isso demonstra que estratégias de movimento baseadas em deslocamentos intermitentes podem tanto facilitar a sobrevivência quanto acelerar o processo de extinção, em função da localização do ponto de reposicionamento e da hostilidade ambiental. Este é um resultado contraintuitivo, desafiando a noção de que deslocamentos mais frequentes a uma localização segura sempre aumentam as chances de sobrevivência.

7

Considerações finais

Em resumo, nos Capítulos 3 e 4 estudamos o problema de busca aleatória unidimensional em que a difusividade depende do estado, modelando a heterogeneidade do meio. Em ambos os casos, a dinâmica é puramente difusiva.

No domínio semi-infinito (Cap. 3), para um perfil em lei de potência, obtivemos a distribuição do DTPP para qualquer interpretação do cálculo estocástico e qualquer expoente do perfil. Em geral, problemas de primeira passagem, puramente difusivos, em um domínio semi-infinito apresentam uma cauda longa do tipo lei de potência na DTPP - comportamento que se mantém no caso da difusividade em lei de potência, onde a cauda depende tanto do expoente α do perfil quanto da interpretação adotada. Para o caso semi-infinito, o TMPP diverge devido a essa característica de cauda longa da DTPP.

Para caracterizar o desempenho da busca, utilizamos o primeiro momento negativo da DTPP, denominado eficiência de busca. Para perfis em lei de potência com expoentes positivos (isto é, perfis monotonicamente crescentes), observamos que quanto menos antecipante é a interpretação, maior é a eficiência. O inverso ocorre para perfis decrescentes, onde valores mais elevados de eficiência correspondem a interpretações mais antecipantes. Essa característica se mantém para outros perfis com comportamento monotônico (crescente ou decrescente), como confirmado numericamente.

No caso particular da interpretação de Stratonovich, obtivemos uma expressão geral para a eficiência de busca válida para qualquer perfil de difusividade. Como consequência, demonstramos que, para qualquer perfil de difusividade heterogêneo, a eficiência de busca é sempre inferior à do caso homogêneo com mesmo nível médio de difusividade no intervalo entre o alvo e a posição inicial. Para outras interpretações, observamos numericamente simetrias entre a reflexão do perfil e a troca de interpretações.

Ao introduzirmos uma barreira refletora (Cap. 4), a DTPP deixa de exibir o comportamento de cauda longa, tornando o TMPP finito. Neste cenário, para a interpretação de Stratonovich, obtivemos resultados analíticos tanto para a eficiência de busca quanto para o TMPP, válidos para qualquer forma funcional da difusividade. Comparamos a eficiência de busca com o inverso do TMPP e, para este último, derivamos uma forma fechada para o caso geral (qualquer difusividade e interpretação). Esse resultado geral nos permitiu confirmar que certas simetrias - anteriormente observadas apenas numericamente para perfis específicos no caso semi-infinito - são válidas para qualquer perfil de

difusividade.

No Capítulo 5, incorporamos o protocolo de RE à dinâmica de busca, com foco no TMPP. Para o caso particular do perfil linear, obtivemos expressões fechadas para qualquer interpretação do ruído multiplicativo. Identificamos dois regimes distintos: (i) um em que o reposicionamento minimiza o tempo médio de busca para uma taxa ótima r^* e (ii) outro em que os reposicionamentos aumentam o tempo médio, prejudicando a chegada ao alvo. Demonstramos que a transição entre esses regimes depende da posição inicial, da forma do perfil de difusividade e da interpretação adotada.

Para perfis arbitrários na interpretação de Stratonovich, obtivemos novamente um resultado fechado. Para as demais interpretações, resultados válidos nos regimes assintóticos foram derivados. Adicionalmente, uma aproximação linear para taxas de reposicionamento suficientemente pequenas permite determinar se o RE será benéfico ou prejudicial ao processo de busca para determinados parâmetros.

O Capítulo ?? é dedicado ao segundo eixo da tese: dinâmica de populações. Neste capítulo estudamos o clássico problema do tamanho crítico de fragmento do habitat com a inclusão do mecanismo do RE. Como primeiro caso, consideramos um ambiente externo (fora do fragmento) totalmente hostil. Neste caso, foi possível derivar resultados semi analíticos para evolução temporal do número de indivíduos e encontrar uma expressão para o tamanho crítico de habitat. Em seguida, abordamos o caso em que fora do habitat viável o ambiente não é totalmente letal, consideramos os casos de reposicionamentos apenas a partir de regiões hostis e reposicionamento em todo o espaço. Destacamos o resultado em que o tamanho crítico de habitat possui dependências não monotônicas em função da posição e taxa de reposicionamento. Portanto, nossos resultados demonstram que os reposicionamentos intermitentes podem tanto favorecer a sobrevivência da população quanto aumentar seu risco de extinção, dependendo dos parâmetros considerados.

Uma possível direção de continuidade no estudo de buscas aleatórias em meios heterogêneos é a extensão da análise para espaços com mais dimensões. Acreditamos que muitos dos resultados apresentados nesta tese, como a Eq. (4-18), podem ser generalizados para o caso d -dimensional, assumindo-se um meio isotrópico.

Outra direção promissora é a introdução de funções de custo associadas ao processo de busca. Investigar as condições que minimizam esse custo em função da heterogeneidade do meio pode revelar novos critérios para a otimização de estratégias de busca.

No que diz respeito ao reposicionamento estocástico em processos de

busca, duas extensões podem ser propostas. A primeira refere-se ao caso em que a taxa de reposicionamento também depende da posição, isto é, $r(x)$. A segunda consiste na consideração de um protocolo de reposicionamento não instantâneo, modelado a partir de potenciais intermitentes [91–93].

A inclusão do RE com duração finita também representa uma perspectiva interessante para o estudo do problema do tamanho crítico de habitat. De fato, a introdução do RE em problemas de ecologia espaço-temporal abre a possibilidade de toda uma linha de pesquisa.

Além disso, em contextos com motivação ecológica, é comum considerar a difusividade dependente da densidade populacional [51, 94], o que representa uma das direções que pretendemos seguir.

A

Algumas definições

A.1

Formula de Itô

A formula de Itô é uma generalização da regra da cadeia do cálculo diferencial para processos estocásticos. Seja $x(t)$ uma variável aleatória que obedece a equação do tipo Itô

$$dx(t) = f[x(t), t] dt + g[x(t), t] dW. \quad (\text{A-1})$$

Agora, seja uma função $h[x(t)]$ desejamos obter a EDE que rege o comportamento desta nova variável. Iniciamos expandindo $dh[x(t)]$ em segunda ordem [5]

$$\begin{aligned} dh[x(t)] &= h[x(t) + dx(t)] - h[x(t)] \\ &= h'[x(t)]dx(t) + \frac{1}{2}h''[x(t)](dx(t))^2, \end{aligned} \quad (\text{A-2})$$

Aplicando a Eq. (A-1) na Eq. (A-2) obtemos

$$dh = h'[x(t)]\{f[x(t), t]dt + g[x(t), t]dW\} + \frac{1}{2}h''[x(t)]g[x(t), t]^2(dW)^2, \quad (\text{A-3})$$

em que os termos de dt de ordem superior são desconsiderados. Note que $(dW)^2 = dt$ [5], então podemos reescrever a Eq (A-2) como

$$dh = \{f[x(t), t]h'[x(t)] + \frac{1}{2}g[x(t), t]^2h''[x(t)]\}dt + g[x(t), t]h'[x(t)]dW, \quad (\text{A-4})$$

que é conhecida como formula de Itô.

A.2

Transformada de Laplace

Para uma função $f(t)$ definida para $t \geq 0$, sua transformada de Laplace é dada por [80, 86]

$$\mathcal{L}\{f(t)\}(s) = \tilde{f}(s) = \int_0^\infty e^{-st} f(t) dt, \quad (\text{A-5})$$

onde s é, em geral, um número complexo com parte real suficientemente grande para garantir a convergência da integral.

A transformada inversa de Laplace permite recuperar $f(t)$ a partir de $\tilde{f}(s)$ e é definida por meio da chamada integral de contorno de Mellin-Bromwich, dada por

$$f(t) = \mathcal{L}^{-1}\{\tilde{f}(s)\}(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{st} \tilde{f}(s) ds, \quad (\text{A-6})$$

onde a constante γ deve ser escolhida de modo que o caminho de integração (uma linha vertical no plano complexo) esteja à direita de todas as singularidades de $\tilde{f}(s)$, garantindo a convergência da integral.

B

Material suplementar do Capítulo 3

B.1

Solução da Eq. (3-7)

Consideremos a equação diferencial na variável de Laplace

$$\tilde{Q}''(y_0, s) + \frac{\lambda}{y_0} \tilde{Q}'(y_0, s) - s \tilde{Q}(y_0, s) = -1. \quad (\text{B-1})$$

Aplicando a transformação

$$\tilde{Q}(y_0, s) = \tilde{q}(y_0, s) + \frac{1}{s}, \quad (\text{B-2})$$

reescrevemos uma equação homogênea para a nova variável \tilde{q}

$$\tilde{q}''(y_0, s) + \frac{\lambda}{y_0} \tilde{q}'(y_0, s) - s \tilde{q}(y_0, s) = 0. \quad (\text{B-3})$$

Realizamos então uma segunda transformação, definida por

$$\tilde{q}(y_0, s) = y_0^{\frac{1-\lambda}{2}} f(y_0, s), \quad (\text{B-4})$$

a qual nos leva à seguinte equação diferencial para $f(y_0, s)$:

$$f''(y_0, s) + \frac{1}{y_0} f'(y_0, s) - \left[s + \left(\frac{\lambda - 1}{2y_0} \right)^2 \right] f(y_0, s) = 0. \quad (\text{B-5})$$

Essa equação corresponde a uma forma modificada da equação de Bessel, cuja solução geral é dada por

$$f(y_0, s) = c_1 K_{\frac{\lambda-1}{2}}(\sqrt{s} y_0) + c_2 I_{\frac{\lambda-1}{2}}(\sqrt{s} y_0), \quad (\text{B-6})$$

onde K_ν e I_ν são, respectivamente, as funções de Bessel modificadas de segunda e primeira espécie. Assim, a solução geral da equação original é

$$\tilde{Q}(y_0, s) = y_0^{\frac{1-\lambda}{2}} \left[c_1 K_{\frac{1-\lambda}{2}}(\sqrt{s} y_0) + c_2 I_{\frac{1-\lambda}{2}}(\sqrt{s} y_0) \right] + \frac{1}{s}. \quad (\text{B-7})$$

Pelas condições de contorno, temos $c_2 = 0$, pois \tilde{Q} deve permanecer finita no limite $y_0 \rightarrow \infty$, enquanto $I_\nu(z)$ diverge nesse limite. A constante c_1 é determinada pela condição de contorno $\tilde{Q}(x_a, s) = 0$, onde x_a é a posição do alvo. Isso nos fornece

$$\tilde{Q}(y_0, s) = \frac{1}{s} \left[1 - \frac{y_0^{\frac{1-\lambda}{2}} K_{\frac{1-\lambda}{2}}(\sqrt{s} y_0)}{y_a^{\frac{1-\lambda}{2}} K_{\frac{1-\lambda}{2}}(\sqrt{s} y_a)} \right]. \quad (\text{B-8})$$

Entretanto, como o alvo está localizado em $y_a = 0$, utilizamos o limite

$$\begin{aligned} \lim_{y_a \rightarrow 0} y_a^{\frac{1-\lambda}{2}} K_{\frac{\lambda-1}{2}}(\sqrt{s} y_a) &\approx \lim_{y_a \rightarrow 0} y_a^{\frac{1-\lambda}{2}} \frac{\Gamma\left(\frac{1-\lambda}{2}\right)}{2^{1-\frac{1-\lambda}{2}}} (\sqrt{s} y_a)^{\frac{\lambda-1}{2}} \\ &= \frac{\Gamma\left(\frac{1-\lambda}{2}\right)}{2^{1-\frac{1-\lambda}{2}}} (\sqrt{s})^{\frac{\lambda-1}{2}}. \end{aligned} \quad (\text{B-9})$$

Portanto, obtemos

$$\tilde{Q}(y_0, s) = \frac{1}{s} \left[1 - \left(\frac{\sqrt{s} y_0}{2} \right)^{\frac{1-\lambda}{2}} \frac{2K_{\frac{1-\lambda}{2}}(\sqrt{s} y_0)}{\Gamma\left(\frac{1-\lambda}{2}\right)} \right], \quad (\text{B-10})$$

que é a mesma expressão da Eq. (3-8) com $(1 - \lambda)/2 = b$.

C

Material suplementar do Capítulo 4

C.1

Probabilidade de sobrevivência no espaço de Laplace ($A = 1$)

Utilizando a mudança de variáveis definida na Eq. (2-55), para a nova variável y , a Eq. (4-1) torna-se

$$\frac{\partial}{\partial t} Q(y_0, t) = \frac{\partial^2}{\partial y_0^2} Q(y_0, t). \quad (\text{C-1})$$

Ao realizar a transformada de Laplace em relação ao tempo, a equação torna-se

$$s\tilde{Q}(y_0, s) - 1 = \frac{\partial^2}{\partial y_0^2} \tilde{Q}(y_0, s). \quad (\text{C-2})$$

Isso leva a

$$\tilde{Q}(y_0, s) = \frac{1}{s} \left(1 + B_1(s)e^{-y_0\sqrt{s}} + B_2(s)e^{y_0\sqrt{s}} \right). \quad (\text{C-3})$$

Aplicando as condições de contorno $Q(0, s) = 0$ e $\partial_y Q|_{y_L} = 0$, obtemos

$$B_1(s) = -B_2(s) - 1 = e^{2y_L\sqrt{s}} B_2(s).$$

Resolvendo para $B_1(s)$ e $B_2(s)$, obtemos

$$\begin{aligned} B_1(s) &= \frac{-e^{2y_L\sqrt{s}}}{e^{2y_L\sqrt{s}} + 1}, \\ B_2(s) &= \frac{-1}{e^{2y_L\sqrt{s}} + 1}. \end{aligned}$$

Substituindo esses resultados de volta na Eq. (C-3), obtemos a Eq. (4-4).

C.2

Inversão de Laplace para a DTPP ($A = 1$)

Com o objetivo de obter a transformada inversa da DTPP

$$\tilde{\wp}(y_0, s) = \frac{\cosh([y_L - y_0]\sqrt{s})}{\cosh(y_L\sqrt{s})}, \quad (\text{C-4})$$

a integral de Mellin-Bromwich (Eq. (A-6)) é utilizada, que neste caso assume a seguinte forma

$$\wp(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \underbrace{\frac{e^{st} \cosh([y_L - y_0]\sqrt{s})}{\cosh(y_L\sqrt{s})}}_{f(s)} ds, \quad (\text{C-5})$$

esta integral pode ser resolvida de pelo teorema de resíduos de Cauchy [86]. Uma vez que as singularidades são dadas a partir dos zeros do denominador, ou seja

$$y_L \sqrt{s} = i \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi, \quad (\text{C-6})$$

desta equação extraímos todas singularidades do integrando $f(s)$ da Eq. (C-5), que são

$$s_n = - \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 \frac{\pi^2}{y_L^2}, \quad (\text{C-7})$$

note que todas as singularidades estão no semi eixo negativo de s , todas contidos na reta real. Consideramos o fechamento do contorno à esquerda, tomando como linha de integração $\gamma = 0$ e fechando o contorno com um semicírculo que engloba o semi-eixo real negativo.

Assim, podemos calcular os resíduos

$$\text{Res}(f, s_n) = \lim_{s \rightarrow s_n} (s - s_n) f(s) \quad (\text{C-8})$$

mas $f(s) = g(s)/h(s)$, então [86]

$$\text{Res}(f, s_n) = \frac{g(s_n)}{h'(s_n)}, \quad (\text{C-9})$$

como $h'(s_n) = y_L^2 (-1)^n / (\pi(2n+1))$, por fim escrevemos os residos como segue

$$\text{Res}(f, s_n) = \frac{\pi(2n+1)}{y_L^2} \text{sen} \left[\pi \left(\frac{1}{2} + n \right) \frac{y_0}{y_L} \right] e^{-\frac{(1/2+n)^2 \pi^2 t}{y_L^2}}. \quad (\text{C-10})$$

Agora basta aplicar o teorema dos residos que diz que a integral sob um circuito fechado é $2\pi i \sum_n \text{Res}(f, s_n)$, que resulta na Eq. (4-6).

C.3

TMPP para A arbitrário

A transformada de Laplace da Eq. (4-17) é

$$s \tilde{Q}_s(x_0) - 1 = D(x_0)^{\frac{A}{2}} \frac{\partial}{\partial x_0} \left\{ D(x_0)^{1-\frac{A}{2}} \frac{\partial}{\partial x_0} \tilde{Q}_s(x_0) \right\}. \quad (\text{C-11})$$

Definindo o TMFP como $T(x_0) = \langle t \rangle = \lim_{s \rightarrow 0} \tilde{Q}_s(x_0)$, a Eq. (C-11) implica

$$-D(x_0)^{-\frac{A}{2}} = \frac{\partial}{\partial x_0} \left\{ D(x_0)^{1-\frac{A}{2}} \frac{\partial}{\partial x_0} T(x_0) \right\}.$$

Após a primeira integração na variável x_0 , obtemos

$$\frac{\partial}{\partial x_0} T(x_0) = B D(x_0)^{-1+\frac{A}{2}} - D(x_0)^{-1+\frac{A}{2}} \int_0^{x_0} D(x')^{-\frac{A}{2}} dx',$$

onde B é uma constante. Após a segunda integração em x_0 , obtemos

$$\begin{aligned} T(x_0) &= B \int_0^{x_0} D(x')^{-1+\frac{A}{2}} dx' \\ &\quad - \int_0^{x_0} D(x'')^{-1+\frac{A}{2}} \int_0^{x''} D(x')^{-\frac{A}{2}} dx' dx''. \end{aligned} \quad (\text{C-12})$$

Para encontrar a constante B , consideramos a condição de reflexão (isto é, $\partial_{x_0} \tilde{Q}|_{x_0=L} = \partial_{x_0} T|_{x_0=L} = 0$, para $s \rightarrow 0$), então

$$BD(L)^{-1+\frac{A}{2}} - D(L)^{-1+\frac{A}{2}} \int_0^L D(x')^{-\frac{A}{2}} dx' = 0,$$

o que leva a

$$B = \int_0^L D(x')^{-\frac{A}{2}} dx'. \quad (\text{C-13})$$

Substituindo B na Eq. (C-12), chegamos à Eq. (4-18).

C.4

Probabilidade de sobrevivência para $D(x) = ax + b$

Aplicando a transformação definida na Eq. (2-55) na Eq. (4-17), obtemos

$$\frac{\partial}{\partial t} Q(y_0, t) = \frac{1-A}{2\sqrt{D(x)}} \frac{dD(x)}{dx} \Big|_{y_0} \frac{\partial}{\partial y_0} Q(y_0, t) + \frac{\partial^2}{\partial y_0^2} Q(y_0, t), \quad (\text{C-14})$$

a qual, para $A = 1$, recupera a Eq. (C-2).

Para um perfil linear $D(x) = ax + b$, a Eq. (2-55) torna-se $y(x) = 2(\sqrt{D(x)} - \sqrt{b})/a$. Então, a Eq. (C-14) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial}{\partial t} Q(y_0, t) = \frac{1-A}{\mu + y_0} \frac{\partial}{\partial y_0} Q(y_0, t) + \frac{\partial^2}{\partial y_0^2} Q(y_0, t), \quad (\text{C-15})$$

onde $\mu = 2\sqrt{b}/a$. A transformada de Laplace da Eq. (C-15) é dada por

$$\frac{\partial^2}{\partial y_0^2} \tilde{Q}(y_0, s) + \frac{1-A}{\mu + y_0} \frac{\partial}{\partial y_0} \tilde{Q}(y_0, s) - s\tilde{Q}(y_0, s) + 1 = 0, \quad (\text{C-16})$$

e, usando o ansatz

$$\tilde{Q}(y_0, s) = (y_0 + \mu)^{\frac{A}{2}} R(y_0, s) + 1/s, \quad (\text{C-17})$$

reescrevemos a Eq. (C-16) como

$$\frac{\partial^2}{\partial y_0^2} R(y_0, s) + \frac{1}{(y_0 + \mu)} \frac{\partial}{\partial y_0} R(y_0, s) - \left[\left(\frac{A}{2(y_0 + \mu)} \right) + s \right] R(y_0, s) = 0,$$

a qual pode ser identificada como uma generalização da equação de Bessel de ordem $A/2$, cuja solução é a combinação linear

$$R(y_0, s) = c_1 K_{\frac{A}{2}} [\sqrt{s}(y_0 + \mu)] + c_2 I_{\frac{A}{2}} [\sqrt{s}(y_0 + \mu)]. \quad (\text{C-18})$$

A partir da Eq. (C-17), temos

$$\tilde{Q}(y_0, s) = (y_0 + \mu)^{\frac{A}{2}} \left(c_1 K_{\frac{A}{2}} [\sqrt{s}(y_0 + \mu)] + c_2 I_{\frac{A}{2}} [\sqrt{s}(y_0 + \mu)] \right) + \frac{1}{s}. \quad (\text{C-19})$$

A condição de contorno $\tilde{Q}(0, s) = 0$ fornece

$$c_1 = -\frac{\mu^{-\frac{A}{2}}}{sK_{\frac{A}{2}}(\mu\sqrt{s})} - c_2 \frac{I_{\frac{A}{2}}(\mu\sqrt{s})}{K_{\frac{A}{2}}(\mu\sqrt{s})}, \quad (\text{C-20})$$

e a condição de contorno refletora, $\left. \frac{\partial Q(y_0, s)}{\partial y_0} \right|_{y_0=y_L} = 0$, fornece

$$c_2 = c_1 \frac{K_{\frac{A}{2}-1}[(y_L + \mu)\sqrt{s}]}{I_{\frac{A}{2}-1}[(y_L + \mu)\sqrt{s}]}. \quad (\text{C-21})$$

Combinando as Eqs. (C-20) e (C-21), obtemos

$$c_1 = -\frac{1}{\mu^{A/2}s} \frac{I_{\frac{A}{2}-1}[(y_L + \mu)\sqrt{s}]}{I_{\frac{A}{2}-1}[(y_L + \mu)\sqrt{s}] K_{\frac{A}{2}}[\mu\sqrt{s}] + K_{\frac{A}{2}-1}[(y_L + \mu)\sqrt{s}] I_{\frac{A}{2}}[\mu\sqrt{s}]}. \quad (\text{C-22})$$

Finalmente, inserindo a Eq. (C-19) na relação $\tilde{\wp}(s) = 1 - s\tilde{Q}(s)$, obtemos a DTPP no espaço de Laplace

$$\wp(s) = \frac{z_0^{\frac{A}{2}}}{\mu^{A/2}} \frac{I_{\frac{A}{2}-1}[z_L\sqrt{s}] K_{\frac{A}{2}}[z_0\sqrt{s}] + K_{\frac{A}{2}-1}[z_L\sqrt{s}] I_{\frac{A}{2}}[z_0\sqrt{s}]}{I_{\frac{A}{2}-1}[z_L\sqrt{s}] K_{\frac{A}{2}}[\mu\sqrt{s}] + K_{\frac{A}{2}-1}[z_L\sqrt{s}] I_{\frac{A}{2}}[\mu\sqrt{s}]}, \quad (\text{C-22})$$

onde definimos $z_0 \equiv y_0 + \mu$ e $z_L \equiv y_L + \mu$. Relembrando a mudança de variáveis usada na Eq. (C-15), $y(x) = 2\sqrt{ax + b}/a - \mu$, a Eq. (C-22) leva imediatamente à Eq. (4-21).

D

Material suplementar do Capítulo 5

D.1

Equações de Fokker-Planck

Aqui mostramos a derivação das EFP (progressiva e retrógrada) para o PDH sob reposicionamento estocástico.

D.1.1

Equação progressiva

Repetimos a dinâmica microscópica dada por

$$x(t + \Delta t) = \begin{cases} \stackrel{1-r\Delta t}{=} & x + \frac{2-A}{2}D'(x) + \sqrt{2D(x)\Delta t}\eta(t), \\ \stackrel{r\Delta t}{=} & x_r, \end{cases} \quad (\text{D-1})$$

e começamos por descrever como a densidade de probabilidade muda ao longo de um intervalo de tempo Δt , através de uma equação que leva em conta as taxas de transição:

$$p(x, t + \Delta t) = \int dx' w(x|x')\Delta t p(x', t) + \left[1 - \Delta t \int dx'' w(x''|x) - r\Delta t\right] p(x, t) + r\Delta t \delta(x - x_r). \quad (\text{D-2})$$

O primeiro termo da Eq. (D-2) refere-se ao caso em que a trajetória se encontra em alguma posição x' e pode transicionar para x no intervalo Δt . O segundo termo representa o caso em que a trajetória permanece em x : A integral representa a probabilidade de a trajetória sair da posição x por difusão, enquanto o termo com a taxa r se refere à saída por reposicionamento. O último termo corresponde à probabilidade de retorno para a posição x_r , ou seja um ganho em x_r . Tomando o limite de $\Delta t \rightarrow 0$, a Eq. (D-2) torna-se

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x, t) = \int dx' [w(x|x')p(x', t) - w(x'|x)p(x, t)] - r p(x, t) + r \delta(x - x_r). \quad (\text{D-3})$$

A Eq. (D-2) assume a forma de uma equação mestra para variáveis contínuas, com os termos adicionais de perda e ganho decorrentes do reposicionamento estocástico. Analisando a integral

$$\int dx' [\dots] = \int d\Delta x [w(x - \Delta x|x)p(x - \Delta x, t) - w(x + \Delta x|x)p(x, t)] \quad (\text{D-4})$$

$$= \int d\Delta x [\omega(\Delta x, x - \Delta x)p(x - \Delta x, t) - \omega(\Delta x, x)p(x, t)], \quad (\text{D-5})$$

onde definimos $\omega(\Delta x, x) = w(x + \Delta x|x)$. Prosseguimos com uma expansão do tipo Kramers-Moyal [5] até o termo de segunda ordem, resultando em

$$\int [\dots] = \int d\Delta x \left\{ (-\Delta x) \frac{\partial}{\partial x} [w(\Delta x, x)p(x, t)] + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [\omega(\Delta x, x)p(x, t)] \right\}. \quad (\text{D-6})$$

Definimos os coeficientes como:

$$D^{(1)}(x) = \int dx' (x' - x) w(x|x') = \int d\Delta x (\Delta x) \omega(\Delta x, x), \quad (\text{D-7})$$

e

$$D^{(2)}(x) = \int dx' (x' - x)^2 w(x|x') = \int d\Delta x (\Delta x)^2 \omega(\Delta x, x), \quad (\text{D-8})$$

com $D^{(1)} = (1 - A/2)D'(x)$ e $D^{(2)} = D(x)$, definidos na Sec.2.3.2. Substituindo os coeficientes $D^{(1)}$ e $D^{(2)}$ na Eq. (D-6) obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} p(x, t) = & \frac{\partial}{\partial x} \left\{ -\left(1 - \frac{A}{2}\right) D'(x) + \frac{\partial}{\partial x} [D(x)p(x, t)] \right\} \\ & - r p(x, t) + r \delta(x - x_r), \end{aligned} \quad (\text{D-9})$$

após uma reorganização de termos obtemos a Eq. (5-3).

D.1.2

Equação retrógrada

Aqui, novamente, temos como objetivo descrever como o estado futuro do sistema é influenciado por variações na condição inicial. Como na Sec. 2.3.1 iniciamos descrevendo a seguinte probabilidade de transição

$$p(x, t|x_0, t_0 - \Delta t_0) = r \Delta t_0 p(x, t|x_r, t_0) + (1 - r \Delta t_0) \langle p(x', t_0 | x_0, t_0 - \Delta t_0) \rangle. \quad (\text{D-10})$$

O primeiro termo se refere a um evento de reposicionamento estocástico no intervalo $[t_0 - \Delta t_0, t_0]$, que ocorre com probabilidade $r \Delta t_0$, a partir daí o caminhante irá evoluir da posição de reposição x_r no tempo t_0 até uma posição qualquer x no tempo t . O segundo termo é ponderado pela probabilidade complementar de não ocorrer eventos de reposicionamento. Note que $\langle \dots \rangle = \int dx' p(x, t|x', t_0) p(x', t_0|x_0, t_0 - \Delta t_0)$, que é exatamente o que temos na Eq. (2-46) da Sec. 2.3.1. Este termo contabiliza a contribuição de todas possíveis trajetórias que ocorrem a partir de um x_0 com intervalo Δt_0 . Uma vez que $x' = x_0 + \Delta x_0$, fazemos a expansão até segunda ordem do ultimo termo e também fazendo $\Delta t_0 \rightarrow 0$, obtemos

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial t_0} p(x, t|x_0, t_0) = & D^{(1)}(x_0) \frac{\partial}{\partial x_0} p(x, t|x_0, t_0) + D^{(2)}(x_0) \frac{\partial^2}{\partial x_0^2} p(x, t|x_0, t_0) \\ & + r p(x, t|x_r, t_0) - r p(x, t|x_0, t_0), \end{aligned} \quad (\text{D-11})$$

em que os coeficientes $D^{(n)}$ são os mesmo da Sec. D.1.1, resultando em

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial t_0} p(x, t|x_0, t_0) &= D(x_0)^{\frac{A}{2}} \frac{\partial}{\partial x_0} \left\{ D(x_0)^{1-\frac{A}{2}} \frac{\partial}{\partial x_0} p(x, t|x_0, t_0) \right\} \\ &+ r p(x, t|x_r, t_0) - r p(x, t|x_0, t_0). \end{aligned} \quad (\text{D-12})$$

Agora, fazemos uma mudança de t_0 para $\tau = t - t_0$ (tempo transcorrido), resultando

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} p(x, \tau|x_0) &= D(x_0)^{\frac{A}{2}} \frac{\partial}{\partial x_0} \left\{ D(x_0)^{1-\frac{A}{2}} \frac{\partial}{\partial x_0} p(x, \tau|x_0) \right\} \\ &+ r p(x, \tau|x_r) - r p(x, \tau|x_0). \end{aligned} \quad (\text{D-13})$$

D.2

TMFP para perfis lineares

Para resolver a Eq. (5-8), começamos introduzindo a seguinte transformação

$$\tau(y_0) = \frac{1}{r} [1 + rT(y_r)] - T(y_0), \quad (\text{D-14})$$

que, substituída na Eq. (5-8), fornece

$$\tau''(y_0) + \frac{1-A}{y_0 + \lambda} \tau'(y_0) - r \tau(y_0) = 0, \quad (\text{D-15})$$

onde $\lambda = 2\sqrt{D_0 - \alpha L/2}/\alpha$. Esse tipo de equação diferencial pode ser convertida em uma equação de Bessel por meio do ansatz

$$\tau(y_0) = (y_0 + \lambda)^{\frac{A}{2}} f(y_0), \quad (\text{D-16})$$

que, substituído na Eq. (D-15), leva a

$$f''(y_0) + \frac{f'(y_0)}{y_0 + \lambda} - \left[r + \left(\frac{A}{2(y_0 + \lambda)} \right)^2 \right] f(y_0) = 0. \quad (\text{D-17})$$

Essa equação pode ser identificada como uma equação de Bessel de ordem $A/2$ na variável $\sqrt{r}(y_0 + \lambda)$. Sua solução geral é expressa como uma combinação linear das funções de Bessel modificadas de primeira e segunda espécies, $I_{\frac{A}{2}}$ e $K_{\frac{A}{2}}$, respectivamente, como segue

$$f(y_0) = c_1 K_{\frac{A}{2}}[\sqrt{r}(y_0 + \lambda)] + c_2 I_{\frac{A}{2}}[\sqrt{r}(y_0 + \lambda)], \quad (\text{D-18})$$

onde c_1 e c_2 são constantes determinadas pelas condições de contorno. Podemos agora expressar a solução geral para $T(y)$ como

$$\begin{aligned} T(y_0) &= \frac{1}{r} [1 + rT(y_r)] \\ &- (y_0 + \lambda)^{\frac{A}{2}} \left[c_1 K_{\frac{A}{2}}[\sqrt{r}(y_0 + \lambda)] + c_2 I_{\frac{A}{2}}[\sqrt{r}(y_0 + \lambda)] \right]. \end{aligned} \quad (\text{D-19})$$

A partir da condição de contorno reflexiva $\left. \frac{dT(y_0)}{dy_0} \right|_{y_L} = 0$, obtemos

$$c_1 = c_2 \frac{I_{\frac{A-2}{2}}[\sqrt{r}(y_L + \lambda)]}{K_{\frac{A-2}{2}}[\sqrt{r}(y_L + \lambda)]}. \quad (\text{D-20})$$

Agora, nossa solução tem a forma

$$\begin{aligned} T(y_0) &= \frac{1}{r} [1 + rT(y_r)] \\ &+ \frac{c_2 (y_0 + \lambda)^{\frac{A}{2}} U_A(\sqrt{r}(y_0 + \lambda), \sqrt{r}(y_L + \lambda))}{K_{\frac{A-2}{2}}[\sqrt{r}(y_L + \lambda)]}, \end{aligned} \quad (\text{D-21})$$

onde,

$$U_A(v, w) = K_{\frac{A}{2}}(v) I_{\frac{A-2}{2}}(w) + I_{\frac{A}{2}}(v) K_{\frac{A-2}{2}}(w),$$

conforme definido na Eq. (5-10). Finalmente, a partir da condição absorvente no alvo, $T(0) = 0$, obtemos

$$c_2 = \frac{(1 + rT(y_r))\lambda^{-\frac{A}{2}} K_{\frac{A-2}{2}}[\sqrt{r}(y_L + \lambda)]}{rU_A(\sqrt{r}\lambda, \sqrt{r}(y_L + \lambda))}, \quad (\text{D-22})$$

que pode ser substituído na Eq. (D-21), e resolvendo a equação resultante de forma autoconsistente, obtemos a Eq. (5-9).

D.3

Aproximações assintóticas

D.3.1

Valores grandes de r ($r \gg 1$)

Para obter a solução da Eq. (5-5) no limite de valores grandes de r , começamos utilizando a transformação introduzida na Eq. (D-14) e definimos o parâmetro perturbativo $\varepsilon = 1/\sqrt{r}$. Assim, a Eq. (5-5) torna-se

$$\varepsilon^2 D(x_0) \tau''(x_0) + \varepsilon^2 \left(1 - \frac{A}{2}\right) D'(x_0) \tau'(x_0) - \tau(x_0) = 0. \quad (\text{D-23})$$

Nosso objetivo agora é resolver essa equação no limite de pequenos valores de ε . Para tanto, consideramos a expansão de WKB

$$\tau(x_0) = \exp \left[\frac{1}{\varepsilon} \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n S_n(x_0) \right], \quad (\text{D-24})$$

e aplicamos na Eq. (D-23), obtendo

$$\begin{aligned} D(x) &\left[(S'_0)^2 + \varepsilon(S''_0 + 2S'_0 S'_1) + \dots \right] \\ &+ \left(1 - \frac{A}{2}\right) D'(x) \left[\varepsilon S'_0 + \varepsilon^2 S'_1 + \varepsilon^3 S'_2 + \dots \right] = 1. \end{aligned} \quad (\text{D-25})$$

Isso leva a

$$S_0 = \pm y(x_0) = \pm \int_0^{x_0} \frac{dx'}{\sqrt{D(x')}}, \quad (\text{D-26})$$

e

$$S_1 = \frac{A-1}{4} \ln [D(x_0)]. \quad (\text{D-27})$$

A aproximação WKB de primeira ordem é então dada por

$$T(x_0) = \frac{1}{r} + T(x_r) + D(x_0)^{\frac{A-1}{4}} \sum_{m=\pm} c_m \exp [m \sqrt{r} y(x_0)]. \quad (\text{D-28})$$

Finalmente, aplicando as condições de contorno, chegamos à Eq. (5-17).

Note-se que o coeficiente WKB S_0 leva naturalmente à mudança de variável definida na Eq. (2-55) e utilizada para transformar a Eq. (5-5) em uma equação de difusão homogênea com adição de termo de força, ou seja, Eq. (5-8). Além disso, quando $A = 1$ (Stratonovich), o coeficiente S_1 se anula, assim como todos os coeficientes de ordem superior, caso em que a solução exata dada por Eq. (5-14) é recuperada, o que significa que o resultado WKB é exato para $A = 1$.

D.3.2

Pequenos valores de r ($r \ll 1$)

Buscamos uma solução para a Eq. (5-5) na forma de uma série perturbativa

$$T^s(x_0) = \sum_{n=0}^{\infty} r^n T_n(x_0). \quad (\text{D-29})$$

O termo de ordem zero $T_0(x_0)$ satisfaz a seguinte equação diferencial

$$D(x_0)^{\frac{A}{2}} \left[D(x_0)^{1-\frac{A}{2}} T_0'(x_0) \right]' + 1 = 0, \quad (\text{D-30})$$

cujas solução explícita é dada por

$$\begin{aligned} T_0(x_0) &= \int_0^L D(x'')^{-\frac{A}{2}} dx'' \int_0^{x_0} D(x')^{-1+\frac{A}{2}} dx' \\ &- \int_0^{x_0} D(x'')^{-1+\frac{A}{2}} \int_0^{x''} D(x')^{-\frac{A}{2}} dx' dx''. \end{aligned} \quad (\text{D-31})$$

Para obter os termos de ordem superior $T_n(x_0)$, substituímos a Eq. (D-29) na Eq. (5-5), obtendo a relação de recorrência

$$D(x_0)^{\frac{A}{2}} \left[D(x_0)^{1-\frac{A}{2}} T_n'(x_0) \right]' = T_{n-1}(x_0) - T_{n-1}(x_r), \quad (\text{D-32})$$

que permite obter o n -ésimo coeficiente

$$T_n(x_0) = \int_0^L G(x|\xi) D(\xi)^{-\frac{A}{2}} [T_{n-1}(\xi) - T_{n-1}(x_r)] d\xi, \quad (\text{D-33})$$

onde a função de Green $G(x|\xi)$ satisfaz

$$\left[D(x_0)^{1-\frac{A}{2}} G'(x_0|\xi) \right]' = \delta(x_0 - \xi), \quad (\text{D-34})$$

e sua forma explícita é

$$G(x_0|\xi) = - \begin{cases} \int_0^{x_0} D(x')^{\frac{A}{2}-1} dx' & \text{se } 0 \leq x_0 \leq \xi, \\ \int_0^\xi D(x')^{\frac{A}{2}-1} dx' & \text{se } \xi \leq x_0 \leq L, \end{cases} \quad (\text{D-35})$$

que satisfaz as condições de contorno do problema.

D.4

Duas fronteiras absorventes

O cenário com duas fronteiras absorventes em $x = 0$ e $x = L$ pode ser resolvido usando a solução geral dada na Eq. (D-19). Aplicando a condição de contorno $T(y_t) = 0$, obtemos

$$c_1 = \frac{\left(\frac{\sqrt{r}}{z_t}\right)^{A/2} \left[1 + rT(y_r) - c_2 \left(\frac{\sqrt{r}}{z_t}\right)^{A/2} I_{A/2}(z_t) \right]}{rK_{A/2}(z_t)}, \quad (\text{D-36})$$

recordando que definimos $z_* \equiv \sqrt{r}(y_* + \lambda)$.

A partir da condição $T(y_L) = 0$, obtemos c_2 , ou seja

$$c_2 = \frac{(1 + rT(y_r)) \left[K_{\frac{A}{2}}(z_L) \left(\frac{\sqrt{r}}{z_t}\right)^{A/2} - K_{\frac{A}{2}}(z_t) \left(\frac{\sqrt{r}}{z_L}\right)^{A/2} \right]}{rW_A(z_L, z_t)}, \quad (\text{D-37})$$

onde $W_A(u, v) = K_{\frac{A}{2}}(u)I_{\frac{A}{2}}(v) - K_{\frac{A}{2}}(v)I_{\frac{A}{2}}(u)$. Utilizando os coeficientes c_1 e c_2 , e resolvendo de forma autoconsistente a Eq. (D-19), chegamos à Eq. (5-23).

E

Material suplementar do Capítulo 6

E.1

Resolvendo a Eq. (6-5)

Procedemos para resolver a Eq. (6-5) aplicando a transformada de Laplace no tempo, o que resulta em

$$\partial_{x_0}^2 N(x_0, s) + (1 - r - s)N(x_0, s) + rN(x_r, s) + N_0 = 0, \quad (\text{E-1})$$

onde N_0 é a população inicial. A solução geral da Eq. (E-1) é

$$\begin{aligned} N(x_0, s) &= c_1 \cos(x_0 \sqrt{1 - r - s}) + c_2 \sin(x_0 \sqrt{1 - r - s}) \\ &- \frac{rN(x_r, s) + N_0}{1 - r - s}, \end{aligned} \quad (\text{E-2})$$

onde as funções são definidas para argumentos complexos.

Como N se anula para as condições iniciais $x_0 = \pm \ell$, então, $c_2 = 0$ e

$$c_1 = \frac{rN(x_r, s) + N_0}{1 - r - s} \sec(\ell \sqrt{1 - r - s}). \quad (\text{E-3})$$

Além disso, a Eq. (E-2) deve ser resolvida de forma autoconsistente, impondo $x_0 = x_r$, o que resulta em

$$N(x_0, s) = N_0 \frac{\cos(x_0 \xi) - \cos(\ell \xi)}{(1 - s) \cos(\ell \xi) - r \cos(x_r \xi)}, \quad (\text{E-4})$$

com $\xi = \sqrt{1 - r - s}$.

Finalmente, a inversão da transformada de Laplace pode ser obtida pela integral de Mellin

$$\frac{N(x_0, t)}{N_0} = \int_{\gamma - i\infty}^{\gamma + i\infty} \frac{ds e^{st}}{2\pi i} \frac{\cos(x_0 \xi) - \cos(\ell \xi)}{(1 - s) \cos(\ell \xi) - r \cos(x_r \xi)}, \quad (\text{E-5})$$

onde γ é uma constante real adequada [86]. O integrando na Eq. (E-5) exibe uma estrutura de singularidade caracterizada por polos s^* determinados como as soluções de

$$(1 - s^*) \cos[\ell \sqrt{1 - r - s^*}] - r \cos(x_r \sqrt{1 - r - s^*}) = 0, \quad (\text{E-6})$$

os quais são reais e podem ser obtidos numericamente. Na ausência de reposição ($r = 0$), a Eq. (E-6) fornece $s^* = 1 - [(2n + 1)\pi/(2\ell)]^2$, com $n = 0, 1, \dots$, e a Eq. (E-5) recupera o resultado conhecido [2, 95], sendo $N(t) = \frac{4N_0}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{2n+1} \exp\left[\left(1 - [(2n + 1)\pi/(2\ell)]^2\right)t\right]$.

Para tempos grandes t , a contribuição dominante para a inversão será determinada pelo maior polo $s_M = \max\{s^*\}$. Aplicando o teorema do resíduo de Cauchy para esse polo, obtemos

$$N(t) \approx \mathcal{N} e^{s_M t}, \quad (\text{E-7})$$

onde $\mathcal{N} \equiv \mathcal{N}(x_0, x_r, r, \ell)$ é dado por

$$\mathcal{N} = \frac{4N_0 \xi_r [\cos(\ell \xi_r) - \cos(x_0 \xi_r)]}{4 \xi_r \cos(\ell \xi_r) - \ell (1 - s_M) \sin(\ell \xi_r) + 2r x_r \sin(x_r \xi_r)}, \quad (\text{E-8})$$

com $\xi_r = \sqrt{1 - r - s_M}$ e N_0 é a população total inicial.

Dessa forma, quando $s^* = 0$, a Eq. (E-6) fornece diretamente o valor crítico de ℓ , ou seja, a Eq. (6-7).

E.2

Resolvendo a forma estacionária da Eq. (6-5)

Uma abordagem alternativa para derivar ℓ_c consiste em resolver a forma estacionária da Eq. (6-5), a saber,

$$\partial_{x_0}^2 N(x_0) + (1 - r)N(x_0) + rN(x_r) = 0, \quad (\text{E-9})$$

com as condições de contorno $N(x_0 = \pm \ell_c) = 0$.

Para $r \neq 1$, obtemos

$$N(x_0) = \frac{r N(x_r)}{1 - r} \left(\frac{\cos(x_0 \sqrt{1 - r})}{\cos(\ell_c \sqrt{1 - r})} - 1 \right). \quad (\text{E-10})$$

Impondo $x_0 = x_r$, para consistência, obtemos diretamente, de forma alternativa, a Eq. (6-7).

Para $r = 1$, a solução da Eq. (E-9) que satisfaz as condições de contorno é

$$N(x_0) = N(x_r)[\ell_c^2 - x_0^2]/2, \quad (\text{E-11})$$

a qual, a partir da relação de consistência em $x_0 = x_r$ fornece

$$\ell_c = \sqrt{x_r^2 + 2}, \quad (\text{E-12})$$

que também pode ser obtida tomando o limite $r \rightarrow 1$ na Eq. (E-10).

E.3

Solução estacionária para um ambiente parcialmente hostil

Em todos os casos, para tratar o problema estacionário, começamos anulando Eqs. (6-3). Devido à sua estrutura linear, as soluções em cada região assumem a forma de funções exponenciais reais nos domínios externos, e uma combinação de funções seno e cosseno (com argumentos reais ou imaginários, dependendo dos parâmetros) dentro da região interna.

As soluções devem satisfazer a continuidade em $x = \pm \ell_c$ e em $x = x_r$. Adicionalmente, o fluxo deve ser contínuo em $x = \pm \ell_c$, o que impõe $u'_{\text{out}} = u'_{\text{in}}$. Em $x = x_r$, a presença de uma delta de Dirac introduz uma descontinuidade na derivada, levando a uma condição de salto $u'(x_r^+) - u'(x_r^-) = -r N_\Omega$. Essas seis

condições levam a um sistema homogêneo de equações para os coeficientes. Para obter soluções não triviais, o determinante da matriz de coeficientes resultante deve se anular. Esta condição determina o valor de ℓ_c .

O procedimento é ilustrado para o caso da Eq. (6-16). Quando $x_r \in \Omega_{\text{in}}$, a solução estacionária é

$$u(x) = \begin{cases} c_1 e^{\gamma x}, & x \in (-\infty, -\ell_c], \\ c_2 \sin(x) + c_3 \cos(x) & x \in [-\ell_c, x_r], \\ c_4 \sin(x) + c_5 \cos(x) & x \in [x_r, \ell_c], \\ c_6 e^{-\gamma x} & x \in [\ell_c, \infty), \end{cases} \quad (\text{E-13})$$

com $\gamma = \sqrt{a+r}$. As condições de continuidade e de contorno são explicitamente

$$\begin{aligned} u_1(-\ell_c) &= u_2(-\ell_c), \\ u'_1(-\ell_c) &= u'_2(-\ell_c), \\ u_2(x_r) &= u_3(x_r), \\ u'_3(x_r) - u'_2(x_r) &= -rN_{\text{out}}, \\ u_3(\ell_c) &= u_4(\ell_c), \\ u'_3(\ell_c) &= u'_4(\ell_c), \end{aligned}$$

onde $N_{\text{out}} = \int_{-\infty}^{\ell_c} u_1(x) dx + \int_{\ell_c}^{\infty} u_4(x) dx$.

Usando a Eq. (E-13), essas condições podem ser escritas na forma matricial como $\mathbf{M}(c_1, c_2, \dots, c_6)^T = (0, 0, \dots, 0)^T$, onde

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} e^{-\gamma \ell_c} & \sin \ell_c & -\cos \ell_c & 0 & 0 & 0 \\ \gamma e^{-\gamma \ell_c} & -\cos \ell_c & -\sin \ell_c & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sin x_r & \cos x_r & -\sin x_r & -\cos x_r & 0 \\ \frac{r}{\gamma} e^{-\gamma \ell_c} & -\cos x_r & \sin x_r & \cos x_r & -\sin x_r & \frac{r}{\gamma} e^{-\gamma \ell_c} \\ 0 & 0 & 0 & \sin \ell_c & \cos \ell_c & -e^{-\gamma \ell_c} \\ 0 & 0 & 0 & \cos \ell_c & -\sin \ell_c & \gamma e^{-\gamma \ell_c} \end{pmatrix} \quad (\text{E-14})$$

Como o sistema é homogêneo, uma solução não trivial requer que $\det \mathbf{M} = 0$, o que leva à equação

$$\gamma^2 \cos \ell_c - r \cos x_r - \gamma \sin \ell_c = 0, \quad (\text{E-15})$$

da qual $\cos \ell_c$ pode ser extraído, resultando na Eq. (6-17).

Para o caso $x_r \in \Omega_{\text{out}}$, a solução da Eq. (6-16) tem a forma

$$u(x) = \begin{cases} c_1 e^{\gamma x}, & x \in (-\infty, -\ell_c], \\ c_2 \sin(x) + c_3 \cos(x) & x \in [-\ell_c, \ell_c], \\ c_4 e^{\gamma x} + c_5 e^{-\gamma x} & x \in [\ell_c, x_r], \\ c_6 e^{-\gamma x} & x \in [x_r, \infty). \end{cases} \quad (\text{E-16})$$

Aplicando as respectivas condições de continuidade e contorno para produzir a matriz \mathbf{M} (não mostrada), a condição de determinante nulo leva à Eq. (6-18), que foi resolvida numericamente.

Procedemos de forma análoga nos casos em que reposições podem ocorrer a partir de qualquer lugar. A principal diferença é que o argumento das funções \sin e \cos é αx (o que, para $r > 1$, leva a funções hiperbólicas), e que o salto na derivada devido à delta de Dirac é proporcional ao total N , em vez de $N_{\Omega_{\text{out}}}$. Então, para $x_r \in \Omega_{\text{in}}$, a condição de singularidade da matriz leva a

$$-\gamma^2 \cos(\alpha \ell_c) + r(1 - r + \gamma^2) \cos(\alpha x_r) + \alpha \gamma \sin(\alpha \ell_c) = 0, \quad (\text{E-17})$$

que pode ser resolvida para $\cos(\alpha \ell_c)$ para obter a forma fechada da Eq. (6-13), enquanto para $x_r \in \Omega_{\text{out}}$, a condição de singularidade da matriz fornece a Eq. (6-14).

E.4

Diagramas de fase

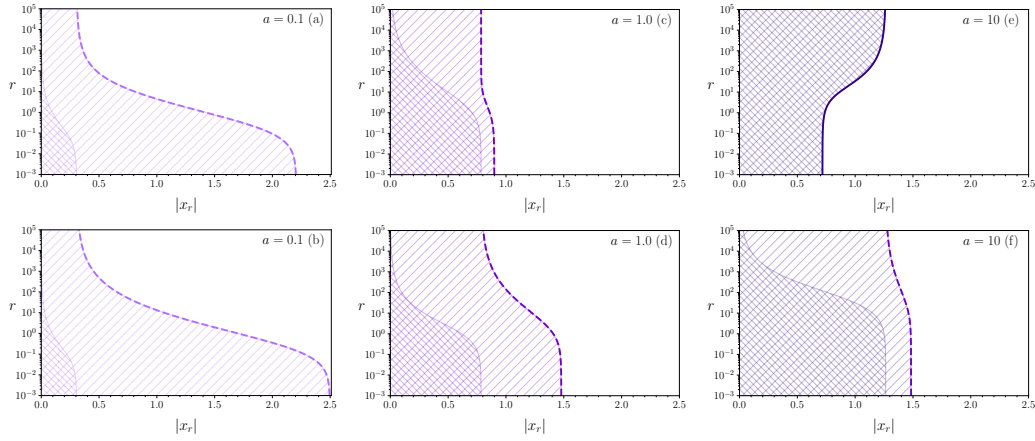


Figura E.1: Diagramas no plano x_r – r , para reposicionamento total, com $\Omega = \Omega_{\text{in}} \cup \Omega_{\text{ex}}$ (linha superior), e reposicionamento parcial, com $\Omega = \Omega_{\text{ex}}$ (linha inferior). Cada um dos três valores distintos de a corresponde a uma coluna, com cores correspondentes às das Figs. 6.6(a) e 6.7(a). A região sombreada é onde o RE o tamanho crítico do habitat, delimitada pela condição $\ell_c(r, x_r) = \ell_c^*$, representada por linha tracejada quando $x_r \in \Omega_{\text{out}}$ ou linha contínua quando $x_r \in \Omega_{\text{in}}$. A região duplamente hachurada (ou hachurada) corresponde à redução do tamanho crítico pelo RE quando x_r pertence (ou não) ao habitat, as quais são delimitadas pela condição $\ell_c = x_r$, dado que $\ell_c < \ell_c^*$ (linha contínua fina).

F

Referências bibliográficas

- [1] F. R. De Hoog, J. H. Knight, and A. Stokes, “An improved method for numerical inversion of laplace transforms,” *SIAM Journal on scientific and Statistical Computing*, vol. 3, no. 3, pp. 357–366, 1982.
- [2] J. Skellam, “Random dispersal in theoretical populations,” *Bulletin of Mathematical Biology*, vol. 53, no. 1-2, pp. 135–165, 1991.
- [3] H. Kierstead and L. Slobodkin, “The size of water masses containing plankton blooms,” *Journal of Marine Research*, 1953.
- [4] A. Einstein, “Über die von der molekularkinetischen theorie der wärme geforderte bewegung von in ruhenden flüssigkeiten suspendierten teilchen,” *Annalen der physik*, vol. 4, 1905.
- [5] C. W. Gardiner *et al.*, *Handbook of stochastic methods*, vol. 3. Springer, 1985.
- [6] R. Zwanzig, *Nonequilibrium statistical mechanics*. Oxford university press, 2001.
- [7] X. Fang, K. Kruse, T. Lu, and J. Wang, “Nonequilibrium physics in biology,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 91, no. 4, p. 045004, 2019.
- [8] S. Chandrasekhar, “Stochastic problems in physics and astronomy,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 15, no. 1, p. 1, 1943.
- [9] D. Grebenkov, *Encounter-Based Approach to Target Search Problems*, pp. 77–105. Springer Nature, 2024.
- [10] M. Von Smoluchowski, “Versuch einer mathematischen theorie der koagulationskinetik,” *Zeitschrift für physikalische Chemie*, vol. 92, no. 1912, p. 156, 1917.
- [11] S. Redner, *A guide to first-passage processes*. Cambridge university press, 2001.
- [12] J. Gorman and E. C. Greene, “Visualizing one-dimensional diffusion of proteins along dna,” *Nature structural & molecular biology*, vol. 15, no. 8, pp. 768–774, 2008.

- [13] Y. Wang, R. H. Austin, and E. C. Cox, “Single molecule measurements of repressor protein 1d diffusion on dna,” *Physical Review Letters*, vol. 97, no. 4, p. 048302, 2006.
- [14] E. L. Charnov, “Optimal foraging, the marginal value theorem,” *Theoretical population biology*, vol. 9, no. 2, pp. 129–136, 1976.
- [15] W. John O’Brien, B. I. Evans, and H. I. Browman, “Flexible search tactics and efficient foraging in saltatory searching animals,” *Oecologia*, vol. 80, pp. 100–110, 1989.
- [16] G. M. Viswanathan, S. V. Buldyrev, S. Havlin, M. Da Luz, E. Raposo, and H. E. Stanley, “Optimizing the success of random searches,” *Nature*, vol. 401, no. 6756, pp. 911–914, 1999.
- [17] G. M. Viswanathan, V. Afanasyev, S. V. Buldyrev, S. Havlin, M. Da Luz, E. Raposo, and H. E. Stanley, “Lévy flights search patterns of biological organisms,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 295, no. 1-2, pp. 85–88, 2001.
- [18] R. Martínez-García, J. M. Calabrese, T. Mueller, K. A. Olson, and C. López, “Optimizing the search for resources by sharing information: Mongolian gazelles as a case study,” *Physical Review Letters*, vol. 110, no. 24, p. 248106, 2013.
- [19] R. Martínez-García, J. M. Calabrese, and C. López, “Optimal search in interacting populations: Gaussian jumps versus lévy flights,” *Physical Review E*, vol. 89, no. 3, p. 032718, 2014.
- [20] J. M. Wolfe and T. S. Horowitz, “What attributes guide the deployment of visual attention and how do they do it?,” *Nature reviews neuroscience*, vol. 5, no. 6, pp. 495–501, 2004.
- [21] T. A. Amor, M. Luković, H. J. Herrmann, and J. S. Andrade Jr, “Influence of scene structure and content on visual search strategies,” *Journal of The Royal Society Interface*, vol. 14, no. 132, p. 20170406, 2017.
- [22] J. Bergstra and Y. Bengio, “Random search for hyper-parameter optimization,” *The journal of machine learning research*, vol. 13, no. 1, pp. 281–305, 2012.
- [23] M. Chupeau, O. Bénichou, and R. Voituriez, “Cover times of random searches,” *Nature Physics*, vol. 11, no. 10, pp. 844–847, 2015.

- [24] A. Pacheco-Pozo, M. Balcerek, A. Wyłomanska, K. Burnecki, I. M. Sokolov, and D. Krapf, “Langevin equation in heterogeneous landscapes: how to choose the interpretation,” *Physical Review Letters*, vol. 133, no. 6, p. 067102, 2024.
- [25] N. Leibovich and E. Barkai, “Infinite ergodic theory for heterogeneous diffusion processes,” *Physical Review E*, vol. 99, p. 042138, 2019.
- [26] A. Zodage, R. J. Allen, M. R. Evans, and S. N. Majumdar, “A sluggish random walk with subdiffusive spread,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2023, no. 3, p. 033211, 2023.
- [27] N. G. Van Kampen, *Stochastic processes in physics and chemistry*, vol. 1. Elsevier, 1992.
- [28] A. Pacheco-Pozo, I. M. Sokolov, R. Metzler, and D. Krapf, “Heterogeneous diffusion in an harmonic potential: the role of the interpretation,” *New Journal of Physics*, vol. 27, no. 6, p. 064602, 2025.
- [29] G. Vaccario, C. Antoine, and J. Talbot, “First-passage times in d -dimensional heterogeneous media,” *Physical Review Letters*, vol. 115, no. 24, p. 240601, 2015.
- [30] J. Sancho, M. S. Miguel, and D. Dürr, “Adiabatic elimination for systems of brownian particles with nonconstant damping coefficients,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 28, pp. 291–305, 1982.
- [31] R. Kupferman, G. A. Pavliotis, and A. M. Stuart, “Itô versus stratonovich white-noise limits for systems with inertia and colored multiplicative noise,” *Physical Review E*, vol. 70, no. 3, p. 036120, 2004.
- [32] M. R. Evans and S. N. Majumdar, “Diffusion with stochastic resetting,” *Physical Review Letters*, vol. 106, no. 16, p. 160601, 2011.
- [33] M. R. Evans and S. N. Majumdar, “Diffusion with optimal resetting,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 44, no. 43, p. 435001, 2011.
- [34] M. R. Evans, S. N. Majumdar, and G. Schehr, “Stochastic resetting and applications,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 53, no. 19, p. 193001, 2020.
- [35] N. R. Smith, S. N. Majumdar, and G. Schehr, “Striking universalities in stochastic resetting processes,” *Preprint arXiv: 2301.11026*, 2023.

- [36] A. Pal and S. Reuveni, “First passage under restart,” *Physical Review Letters*, vol. 118, no. 3, p. 030603, 2017.
- [37] C. A. Plata, D. Gupta, and S. Azaele, “Asymmetric stochastic resetting: Modeling catastrophic events,” *Physical Review E*, vol. 102, no. 5, p. 052116, 2020.
- [38] M. R. Evans, S. N. Majumdar, and G. Schehr, “An exactly solvable predator prey model with resetting,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 55, no. 27, p. 274005, 2022.
- [39] G. Mercado-Vásquez and D. Boyer, “Lotka–volterra systems with stochastic resetting,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 51, no. 40, p. 405601, 2018.
- [40] P. Turchin, “Complex population dynamics: a theoretical/empirical synthesis,” in *Complex population dynamics*, Princeton university press, 2013.
- [41] J. D. Murray, *Mathematical biology: I. An introduction*, vol. 17. Springer Science & Business Media, 2007.
- [42] R. H. MacArthur and E. O. Wilson, *The theory of island biogeography*, vol. 1. Princeton university press, 2001.
- [43] D. Tilman, “Competition and biodiversity in spatially structured habitats,” *Ecology*, vol. 75, no. 1, pp. 2–16, 1994.
- [44] I. Hanski, *Metapopulation ecology*. Oxford university press, 1999.
- [45] L. Fahrig, “Effects of habitat fragmentation on biodiversity,” *Annual review of ecology, evolution, and systematics*, vol. 34, no. 1, pp. 487–515, 2003.
- [46] A. B. Franklin, B. R. Noon, and T. L. George, “What is habitat fragmentation?,” *Studies in avian biology*, vol. 25, pp. 20–29, 2002.
- [47] S. L. Pimm and C. N. Jenkins, “Connecting habitats to prevent species extinctions,” *American Scientist*, vol. 107, no. 3, pp. 162–169, 2019.
- [48] I. Ibáñez, A. Furlan, and R. Dickman, “Reducing species extinction by connecting fragmented habitats: Insights from the contact process,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 603, p. 127614, 2022.

- [49] R. Cantrell and C. Cosner, “Diffusion models for population dynamics incorporating individual behavior at boundaries: applications to refuge design,” *Theoretical population biology*, vol. 55, no. 2, pp. 189–207, 1999.
- [50] R. Cantrell and C. Cosner, “Spatial heterogeneity and critical patch size: area effects via diffusion in closed environments,” *Journal of Theoretical Biology*, vol. 209, no. 2, pp. 161–171, 2001.
- [51] E. Colombo and C. Anteneodo, “Nonlinear population dynamics in a bounded habitat,” *Journal of Theoretical Biology*, vol. 446, pp. 11–18, 2018.
- [52] M. A. F. dos Santos, V. Dornelas, E. H. Colombo, and C. Anteneodo, “Critical patch size reduction by heterogeneous diffusion,” *Physical Review E*, vol. 102, p. 042139, 2020.
- [53] A. L. Lin, B. A. Mann, G. Torres-Oviedo, B. Lincoln, J. Käs, and H. L. Swinney, “Localization and extinction of bacterial populations under inhomogeneous growth conditions,” *Biophysical Journal*, vol. 87, no. 1, pp. 75–80, 2004.
- [54] V. Méndez, I. Llopis, D. Campos, and W. Horsthemke, “Extinction conditions for isolated populations affected by environmental stochasticity,” *Theoretical Population Biology*, vol. 77, no. 4, pp. 250–256, 2010.
- [55] S. Berti, M. Cencini, D. Vergni, and A. Vulpiani, “Extinction dynamics of a discrete population in an oasis,” *Physical Review E*, vol. 92, p. 012722, 2015.
- [56] M. Ballard, V. M. Kenkre, and M. N. Kuperman, “Periodically varying externally imposed environmental effects on population dynamics,” *Physical Review E*, vol. 70, p. 031912, 2004.
- [57] E. H. Colombo and C. Anteneodo, “Population dynamics in an intermittent refuge,” *Physical Review E*, vol. 94, p. 042413, 2016.
- [58] V. Dornelas, P. de Castro, J. M. Calabrese, W. F. Fagan, and R. Martinez-Garcia, “Movement bias in asymmetric landscapes and its impact on population distribution and critical habitat size,” *Proceedings of the Royal Society A*, vol. 480, no. 20240185, 2024.
- [59] T. Neicu, A. Pradhan, D. A. Larochelle, and A. Kudrolli, “Extinction transition in bacterial colonies under forced convection,” *Physical Review E*, vol. 62, pp. 1059–1062, 2000.

- [60] H. Risken, “Fokker-Planck equation,” in *The Fokker-Planck Equation*, pp. 63–95, Springer, 1996.
- [61] L. Peliti and S. Pigolotti, *Stochastic thermodynamics: an introduction*. Princeton university press, 2021.
- [62] P. Hänggi and F. Marchesoni, “Introduction: 100years of brownian motion,” *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, vol. 15, no. 2, 2005.
- [63] P. Langevin *et al.*, “Sur la théorie du mouvement brownien,” *CR Acad. Sci. Paris*, vol. 146, no. 530-533, p. 530, 1908.
- [64] S. M. Iacus *et al.*, *Simulation and inference for stochastic differential equations: with R examples*, vol. 486. Springer, 2008.
- [65] S. Särkkä and A. Solin, *Applied stochastic differential equations*, vol. 10. Cambridge university press, 2019.
- [66] I. Eliazar, “Selfsimilar stochastic differential equations,” *Europhysics Letters*, vol. 136, no. 4, p. 40002, 2022.
- [67] I. Shoji and T. Ozaki, “Estimation for nonlinear stochastic differential equations by a local linearization method,” *Stochastic Analysis and Applications*, vol. 16, no. 4, pp. 733–752, 1998.
- [68] J. Crank, *The mathematics of diffusion*. Oxford university press, 1979.
- [69] V. V. Palyulin, A. V. Chechkin, and R. Metzler, “Lévy flights do not always optimize random blind search for sparse targets,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 111, no. 8, pp. 2931–2936, 2014.
- [70] V. V. Palyulin, A. V. Chechkin, and R. Metzler, “Space-fractional fokker–Planck equation and optimization of random search processes in the presence of an external bias,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2014, no. 11, p. P11031, 2014.
- [71] V. V. Palyulin, V. N. Mantsevich, R. Klages, R. Metzler, and A. V. Chechkin, “Comparison of pure and combined search strategies for single and multiple targets,” *The European Physical Journal B*, vol. 90, no. 9, pp. 1–16, 2017.
- [72] A. Padash, T. Sandev, H. Kantz, R. Metzler, and A. V. Chechkin, “Asymmetric lévy flights are more efficient in random search,” *Fractal and Fractional*, vol. 6, no. 5, p. 260, 2022.

- [73] T. Sandev, A. Iomin, and L. Kocarev, “Random search on comb,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 52, no. 46, p. 465001, 2019.
- [74] V. V. Palyulin, A. V. Chechkin, R. Klages, and R. Metzler, “Search reliability and search efficiency of combined lévy–Brownian motion: long relocations mingled with thorough local exploration,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 49, no. 39, p. 394002, 2016.
- [75] W. T. Vetterling and W. H. Press, *Numerical recipes: example book C*. Cambridge university press, 1992.
- [76] T. Sandev, A. Iomin, and L. Kocarev, “Hitting times in turbulent diffusion due to multiplicative noise,” *Physical Review E*, vol. 102, no. 4, p. 042109, 2020.
- [77] B. O’Shaughnessy and I. Procaccia, “Analytical solutions for diffusion on fractal objects,” *Physical Review Letters.*, vol. 54, pp. 455–458, 1985.
- [78] P. Singh, “Extreme value statistics and arcsine laws for heterogeneous diffusion processes,” *Physical Review E*, vol. 105, p. 024113, 2022.
- [79] A. L. Stella, A. Chechkin, and G. Teza, “Universal singularities of anomalous diffusion in the richardson class,” *Physical Review E*, vol. 107, no. 5, p. 054118, 2023.
- [80] M. Abramowitz, “Handbook of mathematical functions with formulas,” *Graphs, and Mathematical Tables*, 1965.
- [81] R. Durrett, *Probability: theory and examples*, vol. 49. Cambridge university press, 2019.
- [82] X. Durang, S. Lee, L. Lizana, and J.-H. Jeon, “First-passage statistics under stochastic resetting in bounded domains,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 52, no. 22, p. 224001, 2019.
- [83] C. Christou and A. Schadschneider, “Diffusion with resetting in bounded domains,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 48, no. 28, p. 285003, 2015.
- [84] H. A. Kramers, “Wellenmechanik und halbzahlige quantisierung,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 39, no. 10, pp. 828–840, 1926.

- [85] G. Wentzel, “Eine verallgemeinerung der quantenbedingungen für die zwecke der wellenmechanik,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 38, no. 6, pp. 518–529, 1926.
- [86] E. Butkov, *Mathematical physics*. Addison-Wesley, 1973.
- [87] A. Pal and V. Prasad, “Landau-like expansion for phase transitions in stochastic resetting,” *Physical Review Research*, vol. 1, no. 3, p. 032001, 2019.
- [88] A. Pal and V. Prasad, “First passage under stochastic resetting in an interval,” *Physical Review E*, vol. 99, no. 3, p. 032123, 2019.
- [89] W. J. Bell, *Central place foraging*, pp. 171–187. Springer, 1990.
- [90] B. Van Moorter, C. M. Rolandsen, M. Basille, and J.-M. Gaillard, “Movement is the glue connecting home ranges and habitat selection,” *Journal of Animal Ecology*, vol. 85, no. 1, pp. 21–31, 2016.
- [91] A. S. Bodrova and I. M. Sokolov, “Resetting processes with noninstantaneous return,” *Physical Review E*, vol. 101, no. 5, p. 052130, 2020.
- [92] G. Mercado-Vásquez, D. Boyer, S. N. Majumdar, and G. Schehr, “Intermittent resetting potentials,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2020, no. 11, p. 113203, 2020.
- [93] D. Gupta, A. Pal, and A. Kundu, “Resetting with stochastic return through linear confining potential,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2021, no. 4, p. 043202, 2021.
- [94] G. Piva and C. Anteneodo, “Influence of density-dependent diffusion on pattern formation in a refuge,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 658, p. 130305, 2025.
- [95] D. Ludwig, D. Aronson, and H. Weinberger, “Spatial patterning of the spruce budworm,” *Journal of Mathematical Biology*, vol. 8, no. 3, pp. 217–258, 1979.