



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE**  
**CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

**Difusão clássica em cadeias lineares com exclusão  
de volume e resetting utilizando as técnicas do  
espaço de Fock**

**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO**

**Enoque Ferreira Macedo**

**São Cristóvão/SE**

**Junho/2025**

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE**  
**CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

**Enoque Ferreira Macedo**

**Difusão clássica em cadeias lineares com exclusão  
de volume e resetting utilizando as técnicas do  
espaço de Fock**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Sergipe como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Gerson Cortês Duarte Filho

**São Cristóvão/SE**

**Junho/2025**

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE  
Programa de Pós-Graduação em Física

**“Difusão clássica em cadeias lineares com exclusão de volume e resetting utilizando as técnicas do espaço de Fock”**

por

Enoque Ferreira Macedo

Dissertação de mestrado **APROVADA** em sessão pública no dia vinte e dois de julho do ano dois mil e vinte e cinco perante a banca examinadora constituída pelos seguintes professores:

Documento assinado digitalmente  
 **GERSON CORTES DUARTE FILHO**  
Data: 22/07/2025 12:20:30-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Gerson Cortês Duarte Filho  
(DFI-UFS)

Documento assinado digitalmente  
 **WILLIAM DE SOUZA SANTOS**  
Data: 22/07/2025 15:10:21-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. William de Souza Santos  
(DFI-UFS)

Documento assinado digitalmente  
 **CESAR IVAN NUNES SAMPAIO FILHO**  
Data: 22/07/2025 12:51:04-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Cesar Ivan Nunes Sampaio Filho  
(DF-UFC)

# Agradecimentos

A Deus.

Aos meus pais, Luiz Carlos Souza Macedo e Vólia Ferreira Macedo por todo o incentivo e por sempre acreditarem em mim e apoiarem este caminho que escolhi seguir.

Ao meu orientador, Gerson Cortês Duarte Filho pela oportunidade a mim dada para realizar esta pesquisa, bem como todas as orientações sempre em alto nível, com compreensão, paciência e companheirismo. É um imenso prazer para mim podermos trabalhar juntos.

À minha namorada e companheira Andressa Rocha da Silva por estar comigo em toda esta minha trajetória acadêmica e pela compreensão nos meus momentos de ausência.

Ao meu colega de pesquisa e amigo Arthur Matheus de Souza Carvalho pela ajuda com a programação numérica.

Ao programa de Pós-Graduação em Física da UFS e à CAPES.

# Resumo

Os efeitos da reinicialização em processos de busca aleatória incluem atrasos na conclusão de processos, assimetrias no processo de difusão, superlotação e a origem do problema de otimização dos momentos do tempo de primeira passagem em sistemas físicos estocásticos. Além disso, a exploração da reinicialização em dinâmicas estocásticas tem a capacidade de modelar comportamentos de busca humana e animal, explorações robóticas que dependem de estratégias de reinicialização, buscas de proteínas no DNA, entre outras. Dentro deste contexto, faremos uso do formalismo do espaço de Fock, que nos permitirá utilizar operadores de segunda quantização adaptados ao cenário clássico, com o objetivo de incluir o processo de reinicialização na difusão clássica em cadeias lineares com exclusão de volume. A partir deste ponto, exploramos uma série de implicações físicas geradas por esta inclusão, bem como a criação de estratégias de otimização.

**Palavras-chave:** Processos de busca aleatória. Otimização de buscas. Reinicialização estocástica. Difusão.

# Abstract

The effects of resetting in random search processes include backwardness in process completion, asymmetries in the diffusion process, overcrowding, and the origin of the optimization problem of first-pass time moments in stochastic physical systems. Besides, the exploration of resetting in stochastic dynamics has the ability to model human and animal search behavior, robotic explorations that depend on resetting strategies, protein searches on DNA, among others. In this context, we will make use of the Fock space formalism, which allows us to use second quantization operators adapted to the classical scenario with the aim of including the resetting process into classical diffusion in linear chains with volume exclusion. From this point, we explore a series of physical implications resulting from this inclusion, as well as the creation of optimization strategies.

**Keywords:** Random search process. Search optimization. Stochastic resetting. Diffusion.

# Lista de ilustrações

Figura 1 – Exemplo de ilustração de uma rede de Petri estocástica para um sistema de difusão clássica em cadeias lineares com resetting e um último sítio, $S4$ como absorvedor. Podemos notar que a cadeia possui quatro sítios e uma partícula e o sítio de resetting é o $S2$ . A partícula ao chegar em $S4$ fica aprisionada, finalizando assim o processo. . . . .	26
Figura 2 – Ilustração simples de um grafo de estados para uma cadeia fermiônica com quatro sítios. Neste sistema, o sítio de resetting é o primeiro, ou seja, $r = 1$ . Estão incluídas duas partículas na cadeia. As possibilidades de estado são: $ 1\rangle =  1100\rangle$ , $ 2\rangle =  1010\rangle$ , $ 3\rangle =  1001\rangle$ , $ 4\rangle =  0110\rangle$ , $ 5\rangle =  0101\rangle$ e $ 6\rangle =  0011\rangle$ . Podemos captar, através deste grafo com direções, toda a dinâmica do sistema, de uma forma geral. . . . .	27
Figura 3 – Diagrama de Feynman envolvendo o espalhamento de dois elétrons por meio da troca envolvendo um fóton virtual. A notação $K_+(4, 6)$ , por exemplo, representa uma função associada à propagação do elétron, do vértice 6 até o ponto 4. Os vértices representam os pontos de interação direta, neste caso, com um fóton virtual. Desta forma, o elétron que vem da reta 1 emite um fóton virtual no vértice 5 que será absorvido pelo elétron 2 no vértice 6, posteriormente, os elétrons serão espalhados. O sinal + na função $K_+(j, k)$ pode ser interpretado que esta função de propagação possui sentido positivo em relação ao eixo temporal. Esta figura foi extraída da bibliografia referenciada em [Feynman 1949]. . . . .	28
Figura 4 – Ilustração de um diagrama de Feynman para uma cadeia linear composta por uma partícula em quatro sítios, sendo $S2$ o sítio de reinicialização e $S4$ o absorvedor. A cadeia possui um viés no sentido do último sítio. A partícula inicia-se no sítio $S1$ e pode ser resetada a qualquer momento por meio de uma taxa $R$ para o sítio $S2$ . As curvas onduladas representam os eventos de resetting e as retas são processos de difusão entre os sítios(vértices). Esse diagrama representa uma possível história do sistema. . . . .	29
Figura 5 – Ilustração do processo de difusão com resetting para duas partículas em nove sítios com $ \Psi\rangle =  010001000\rangle$ . . . . .	34
Figura 6 – Mapa de calor do número de simulações necessárias $N$ em função do desvio padrão( $\sigma$ ou $\text{Var}[T_i]$ ) e do erro desejado $\delta$ . As cores mais claras indicam onde há maiores valores para $N$ , enquanto que as mais escuras são menores. . . . .	37

Figura 7 – Gráfico de $\langle T \rangle$ vs $n$ . As curvas vermelhas representam o comportamento do MFPT com resetting, enquanto que as curvas azuis refletem o comportamento sem resetting. Podemos observar que a diferença de MFPT entre as curvas vermelha e azul diminui conforme a taxa $R$ é também diminuída. . . . .	41
Figura 8 – Distribuição de probabilidade do tempo de primeira passagem para duas partículas em dez sítios com $ \Psi(0)\rangle =  1100000000\rangle$ . . . . .	41
Figura 9 – Médias e variâncias para duas partículas em quatro sítios com $R = 1$ e $ \Psi(0)\rangle =  1100\rangle$ . . . . .	42
Figura 10 – Médias e variâncias para duas partículas em dez sítios, com $R = 1$ e $ \Psi(0)\rangle =  1100000000\rangle$ . . . . .	42
Figura 11 – Médias e variâncias para duas partículas em quatro sítios, com $R = 0.1$ e $ \Psi(0)\rangle =  1100\rangle$ . . . . .	43
Figura 12 – Gráfico do MFPT em função do número de sítios $\langle T \rangle$ vs $n$ com viés para a direita. A curva azul é referente a curva sem resetting, enquanto que a curva com resetting (vermelha) possui uma taxa $R = 1$ . Os dados de MFPT foram obtidos até $n = 12$ sítios. . . . .	44
Figura 13 – Distribuição de probabilidade FPT para $ \Psi(0)\rangle =  000001100000\rangle$ e $ \Psi(0)\rangle =  111111000000\rangle$ , com $R = 1$ , $D_L = \frac{1}{3}$ e $D_R = \frac{2}{3}$ . . . . .	45
Figura 14 – Gráfico do MFPT em função do número de sítios $\langle T \rangle$ vs $n$ com viés para a esquerda. A curva azul é referente a curva sem resetting, enquanto que a curva com resetting (vermelha) possui uma taxa $R = 1$ . Os dados de MFPT foram obtidos até $n = 11$ sítios. . . . .	46
Figura 15 – As três figuras mostram a dinâmica do MFPT para duas partículas em cinco a quatorze sítios com difusão simétrica $D_R = D_L = 1$ , onde o sítio $r$ está localizado no centro geométrico da cadeia para sítios ímpares e descentralizado em um passo do centro geométrico para a direita em sítios pares. A posição inicial das partículas é $ \Psi(0)\rangle =  110\dots\rangle$ . . . . .	50
Figura 16 – Esquema de um processo de transição entre estados sobreviventes e absorvedores de um sistema físico representado por $H_\gamma$ . As setas verticais representam as transições diretas dos estados de sobrevivência para os absorvedores e as horizontais representam transições entre estados referentes ao mesmo subespaço. . . . .	53
Figura 17 – Exemplo de ilustração do comportamento das curvas $\langle T(R) \rangle$ em função da taxa de reinicialização $R$ obtidas através do método de Autovetores Eq. (4.78) e o método da Matriz inversa Eq. (4.34) . . . . .	58

# Lista de tabelas

Tabela 1 – Comportamento do MFPT para vários valores do parâmetro de resetting $R$ em função do número de sítios $n$ . . . . .	40
Tabela 2 – Comparação entre o MFPT de caminhadas assimétricas sem resetting ( $R = 0$ ) e com resetting ( $R = 1$ ) em função do número de sítios $n$ . As taxas de difusão são $D_L = \frac{1}{3}$ e $D_R = \frac{2}{3}$ . . . . .	44
Tabela 3 – Comparação entre o MFPT de caminhadas assimétricas sem resetting ( $R = 0$ ) e com resetting ( $R = 1$ ) em função do número de sítios $n$ . As taxas de difusão são $D_L = \frac{2}{3}$ e $D_R = \frac{1}{3}$ . . . . .	46

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>11</b>
1.1	Busca e reinicialização em sistemas complexos	11
1.2	Tempo médio de primeira passagem	13
1.3	O espaço de Fock	13
<b>2</b>	<b>Revisão de Literatura</b>	<b>16</b>
2.1	Sistemas dinâmicos	16
2.2	Difusão em meios contínuos	16
2.2.1	O movimento Browniano e difusão	16
2.2.2	Difusão com resetting	17
2.2.3	Tempo médio de primeira passagem (MFPT)	18
2.2.4	A inclusão de limites absorventes	21
2.2.5	Otimização da taxa de resetting	22
<b>3</b>	<b>Metodologia</b>	<b>24</b>
3.1	Processos Markovianos	24
3.2	A rede de Petri estocástica	25
3.3	O diagrama de Feynman	27
3.4	Formalismo do espaço de Fock e operadores de segunda quantização em problemas de difusão clássica	29
3.4.1	Técnicas quânticas na Mecânica Estocástica	29
3.4.1.1	Operadores de criação e aniquilação	30
3.4.1.2	Mapeamento da equação mestra em uma equação tipo Schrödinger	31
3.4.1.3	Propriedades de $H_\gamma$	31
3.4.1.4	A difusão clássica em cadeias lineares	32
3.5	Obtenção do quasi-hamiltoniano com reinicialização	33
3.5.1	Propriedades de $H_R$ ou $H'_R$	34
3.6	Processos de busca e otimização	35
3.6.1	A difusão como um processo de busca	37
<b>4</b>	<b>Resultados e Discussões</b>	<b>39</b>
4.1	Influência da reinicialização no MFPT	39
4.1.1	Caminhadas aleatórias simétricas	39
4.1.1.1	MFPT em função do parâmetro de resetting variando o tamanho da cadeia	40
4.1.1.2	Médias e Variâncias	41
4.1.2	Caminhadas aleatórias assimétricas e superlotação	43
4.1.2.1	Estudo do MFPT com viés para a direita	43

4.1.2.2	Estudo do MFPT com viés para a esquerda . . . . .	45
4.2	Métodos analíticos para a obtenção de uma taxa $R^*$ otimizada . . . . .	46
4.2.1	Os momentos de saída em termos de $H'_\gamma$ . . . . .	47
4.2.2	Obtendo $R^*$ . . . . .	47
4.2.3	Forma alternativa de obtenção de $R^*$ . . . . .	52
4.2.3.1	Distribuição FPT a partir da equação mestra . . . . .	52
4.2.3.2	A diagonalizabilidade de $H^*$ . . . . .	53
4.2.3.3	A distribuição FPT $f(t, R)$ . . . . .	54
4.2.3.4	Obtenção do MFPT, a partir de $f(t, R)$ . . . . .	58
<b>5</b>	<b>Conclusões</b> . . . . .	<b>59</b>
	<b>Referências</b> . . . . .	<b>61</b>

# 1 Introdução

Neste capítulo iniciamos com uma apresentação aos processos de buscas aleatórias observados na natureza, com o objetivo de motivar o uso de estratégias de reinicialização aplicadas em problemas estocásticos (frequentemente utilizaremos o termo *resetting* como sinônimo de reinicialização). Na sequência, abordaremos o conceito de tempo médio de primeira passagem. Por fim, introduzimos o formalismo do espaço de Fock, que nos fornecerá a base principal para a formulação matemática deste trabalho.

## 1.1 Busca e reinicialização em sistemas complexos

A reinicialização refere-se a um processo em que o sistema é periodicamente ou aleatoriamente retornado a um estado inicial ou intermediário predefinido, interrompendo sua evolução natural. Essa estratégia é frequentemente empregada em sistemas estocásticos para influenciar propriedades como tempos de primeira passagem, taxas de sucesso em buscas ou mesmo para controlar a dinâmica de sistemas complexos [Evans e Majumdar 2011].

Estratégias que envolvem reinicialização podem ser aplicadas ao estudo de sistemas diversos, incluindo aqueles que não estão estritamente relacionados a processos físicos. Por exemplo, a busca por recursos no mundo animal ilustra um espectro que vai desde padrões altamente determinísticos até ações completamente aleatórias. [Raposo et al. 2008]. Outro exemplo no mundo animal é a dinâmica predador-presa com foco na sobrevivência da presa [Evans, Majumdar e Schehr 2022]. Esse problema pode ser tratado como um sistema composto por duas partículas difusivas, brownianas e interagentes: uma representando a presa e a outra o predador. A interação entre a presa e o predador depende de seu movimento aleatório relativo. Nesse contexto, o *resetting* está relacionado a uma tendência do predador de voltar periodicamente a posições previamente visitadas. Essa estratégia pode aumentar as chances de sobrevivência da presa ao permitir que ela se adapte ou escape com mais eficácia, explorando o padrão de movimentação do predador.

No contexto de buscas realizadas por humanos, uma busca eficiente em ambientes onde os recursos são escassos e imprevisíveis pode ser realizada utilizando os vôos de Lévy (Lévy flights). Estes vôos são um tipo de caminhada aleatória caracterizada pela existência de passos raros, mas extremamente grandes, alternando entre sequências de muitos saltos curtos [Shlesinger e Klafter 1986]. Estas propriedades fazem com que os processos relacionados à mesma apresentem dinâmicas anômalas (superdifusivas), em contraste com a dinâmica difusiva observada em caminhadas brownianas, que são dominadas pelo teorema do limite central [Raposo et al. 2009]. No contexto da vida cotidiana urbana,

os padrões de mobilidade (comprimento de trajetos percorridos), presentes em grandes cidades, podem ser analisados e interpretados por distribuições compatíveis ao modelo de Lévy [Jiang, Yin e Zhao 2013]. A inclusão do resetting em tal contexto poderia contribuir para o desenvolvimento de resultados mais realistas, levando a um possível refinamento da logística e planejamento urbano.

Ainda no cotidiano humano, mais especificamente na área econômica, a busca aleatória pode ser aplicada no contexto das negociações, ou seja, em um mercado eficiente, os preços das ações movem-se aleatoriamente devido à sua natureza imprevisível. A caminhada aleatória sugere que os preços de ações, com base em movimentos passados, seguem um caminho aleatório e, portanto, são imprevisíveis [Oluwafemi, Famakinwa e Balogun 2024]. Sabendo que o mercado de ações está sujeito a enfrentar crises financeiras que podem ser imprevisíveis, modelar um sistema econômico com resetting pode ajudar a realizar simulações em que o preço das ações de mercado pode cair e retornar ao valor inicial. Desta forma, uma modelagem com resetting pode auxiliar investidores a tomar melhores decisões.

No contexto da neurologia, mais especificamente na área da busca cognitiva, existem propostas de modelos computacionais que explicam como os seres humanos acessam itens da memória cerebral no contexto de tarefas envolvendo fluência verbal. As tarefas de fluência verbal são amplamente utilizadas na neurociência para avaliar a recuperação da memória de um determinado paciente. Desta forma, a busca na memória pode ser interpretada como uma caminhada aleatória sobre uma rede semântica [Jun et al. 2015]. Incluir o resetting neste processo tem potencial para fazer com que o agente (pesquisador), com uma determinada taxa  $R$ , seja reinicializado para um determinado nó (origem) do grafo semântico. Esta situação representa o retorno a uma determinada ideia após uma compilação de buscas pouco produtivas. Este raciocínio de busca cognitiva com resetting pode ser vantajoso em aplicações envolvendo modelos matemáticos e conceituais de tomadas de decisões envolvendo a memória, acabando por ser benéfico ao tratamento de pacientes com problemas de saúde que envolvam o declínio funcional da memória [Fenneman e Sanfey 2022].

Na área de biomedicina, mais especificamente no estudo do DNA, existe a necessidade de desenvolver métodos de busca eficientes para localizar alvos na estrutura do DNA. Esta busca por alvos pode ser mediada pelas proteínas (agentes), que por sua vez, podem comportar-se como partículas difusivas à procura de alvos em sítios discretos (em geometrias unidimensionais e tridimensionais). Para haver uma melhor compreensão acerca dos aspectos dinâmicos das interações DNA-proteínas, é importante modelar um sistema estocástico de estados discretos em que o DNA seja uma cadeia de sítios [Shvets, Kochugaeva e Kolomeisky 2018]. Tendo em vista que as proteínas podem desligar-se temporariamente do DNA através do fenômeno de dissociação facilitada [Erbaş e Marko

2019], a inclusão do resetting pode fornecer uma ferramenta conceitual para modelar a dissociação facilitada e tornar a descrição do sistema mais realista.

Em relação ao contexto da exploração robótica, existem buscas aleatórias relacionadas à robótica em enxame, mais conhecidas como *swarm robotics*. A robótica em enxame é uma área da multirrobótica na qual um grande número de robôs é coordenado de forma distribuída e descentralizada, de forma que cada robô realize a exploração baseada em regras locais, ou seja, sem um “robô comandante”, de forma similar ao comportamento coletivo dos insetos [Navarro e Matía 2013]. Para este tipo de exploração robótica, os modelos mais utilizados são os vãos de Lévy e o movimento browniano; há modelos aprimorados destes tipos de caminhadas tradicionais que baseiam-se na densidade do enxame e melhoram a eficiência na busca [Zhang et al. 2020].

Em resumo, o resetting pode tornar sistemas estocásticos mais realistas e oferecer melhores estratégias de busca em buscas aleatórias.

## 1.2 Tempo médio de primeira passagem

A probabilidade de primeira passagem pode ser entendida como a probabilidade de que um determinado evento de interesse ocorra pela primeira vez. Essa probabilidade é útil para o estudo da difusão [Duarte-Filho, Santos e Gaffney 2020], relação entre DNA e proteína [Shvets, Kochugaeva e Kolomeisky 2018], neurologia [Jun et al. 2015], entre outras. Denominamos por alvo o alcance de um evento de interesse em um determinado tempo.

O tempo para que o alvo seja atingido pela primeira vez é conhecido como FPT (do termo em inglês *first passage time*) ou simplesmente,  $T$ . A densidade de probabilidade de primeira passagem (FPT), denotada por  $f(t)$ , quantifica a probabilidade de um dado evento de interesse ocorrer pela primeira vez no instante  $t$ . Por ser uma distribuição de probabilidade,  $f(t)$  deve ser devidamente normalizada, satisfazendo a condição:

$$\int_0^{\infty} f(t)dt = 1. \quad (1.1)$$

A média ou valor esperado da variável  $T$  é

$$\langle T \rangle = \int_0^{\infty} tf(t)dt, \quad (1.2)$$

onde  $\langle T \rangle$  é mais conhecido como MFPT (tempo médio de primeira passagem).

## 1.3 O espaço de Fock

Na mecânica quântica, o espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$  é adequado para descrever sistemas onde o número de partículas é fixo. Entretanto, quando o número de partículas pode variar,

essa descrição torna-se limitada, exigindo uma generalização, como o espaço de Fock. O espaço de Fock pode ser definido como:

$$\mathcal{F}(\mathcal{H}) = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}_{\pm}^{\otimes n}, \quad (1.3)$$

onde  $\mathcal{H}_{\pm}^{\otimes n}$  é o produto tensorial do espaço de Hilbert consigo mesmo,  $n$  vezes. Para um subespaço de Hilbert com partículas bosônicas, temos  $\mathcal{H}_{+}^{\otimes n}$  e para férmions usamos  $\mathcal{H}_{-}^{\otimes n}$ . Essa convenção é compatível com a formulação apresentada por [Razo et al. 2022], entretanto, com o operador de anti(simetrização)  $S_n$  omitido. Para um espaço de Fock obedecendo à estatística de Fermi, temos:

$$\mathcal{F}_{-}(\mathcal{H}) = \mathcal{H}_{-}^{(0)} \oplus \mathcal{H}_{-}^{(1)} \oplus \mathcal{H}_{-}^{(2)} \oplus \dots \mathcal{H}_{-}^{(n)}, \quad (1.4)$$

onde  $\mathcal{F}_{-}(\mathcal{H})$  denota um espaço vetorial dotado de características fermiônicas (obedecendo o princípio de exclusão de Pauli). O espaço de Hilbert  $\mathcal{H}_{-}^{(0)}$  é o espaço de vácuo (ausência de partículas),  $\mathcal{H}_{-}^{(1)}$  contém uma partícula,  $\mathcal{H}_{-}^{(2)}$  contém duas, e assim sucessivamente, o espaço  $\mathcal{F}_{-}(\mathcal{H})$  consegue englobar vários espaços de Hilbert e permite construir uma superposição entre eles.

Pelo fato de conseguir englobar vários espaços de Hilbert, o espaço de Fock se mostra uma ferramenta indispensável para estruturarmos a dinâmica da difusão clássica em cadeias lineares. Considere, por exemplo, uma cadeia formada por três sítios com exclusão de volume, o espaço de Hilbert para  $N = 1$  será:

$$\mathcal{H}_{-}^{(1)} = \{|100\rangle, |010\rangle, |001\rangle\}, \quad (1.5)$$

para  $N = 2$ :

$$\mathcal{H}_{-}^{(2)} = \{|110\rangle, |101\rangle, |011\rangle\}, \quad (1.6)$$

para  $N = 3$ :

$$\mathcal{H}_{-}^{(3)} = \{|111\rangle\}. \quad (1.7)$$

Onde o espaço de Fock será:

$$\mathcal{F}_{-}(\mathcal{H}) = \mathcal{H}_{-}^{(0)} \oplus \mathcal{H}_{-}^{(1)} \oplus \mathcal{H}_{-}^{(2)} \oplus \mathcal{H}_{-}^{(3)}. \quad (1.8)$$

O espaço de Fock é particularmente útil devido à presença de operadores de criação e aniquilação, que permitem a descrição da adição ou remoção de partículas nos diferentes subespaços que o compõem. Esses operadores são comumente utilizados no formalismo de segunda quantização para estudar sistemas quânticos de muitos corpos. Entretanto, eles podem ser adaptados para descrever problemas estocásticos clássicos [Doi 1976]. Trabalhos deste tipo são vistos em modelos estocásticos SIR [Souza et al. 2022], difusão [Duarte-Filho, Santos e Gaffney 2020], sistemas de reação-difusão [Razo et al. 2022], entre outros.

No capítulo 2, apresentamos uma revisão da literatura acompanhada por fundamentações teóricas. No capítulo 3, discutimos a metodologia do trabalho. No capítulo 4, mostraremos os resultados obtidos, acompanhando-se pela análise e interpretação dos mesmos. Por fim, as conclusões e perspectivas são abordadas no capítulo 5.

## 2 Revisão de Literatura

Este capítulo tem como objetivo introduzir o leitor ao contexto atual da difusão unidimensional com reinicialização estocástica. Para tanto, apresentaremos a fundamentação teórica essencial, que será construída a partir de uma introdução aos sistemas dinâmicos, seguindo-se da análise de trabalhos relevantes e diretamente alinhados ao tema central desta dissertação. É oportuno destacarmos que, frequentemente, utilizaremos a palavra “resetting” para nos referirmos à “reinicialização”.

### 2.1 Sistemas dinâmicos

Nesta seção, introduzimos o conceito de sistemas dinâmicos, necessário para o entendimento do problema central deste trabalho, que é a difusão clássica em cadeias lineares por meio das técnicas do espaço de Fock.

Existem diversos tipos de sistemas dinâmicos, tendo em vista que o conceito geral dos mesmos é caracterizado pela presença de uma evolução temporal. Um modelo simples de sistema dinâmico é o sistema unidimensional independente da variável de tempo  $t$ , onde

$$\dot{x} = f(x), \quad (2.1)$$

e  $\dot{x}$  é a derivada temporal da variável  $x$ . Essa equação é determinística. Os sistemas dinâmicos determinísticos podem ser estudados por diversas técnicas analíticas, qualitativas e numéricas [Strogatz 1994].

Certos tipos de sistemas físicos, como o pêndulo duplo, possuem movimento aleatório devido a sensibilidade que possuem as condições iniciais. Entretanto, existem sistemas dinâmicos que possuem aleatoriedade inerente. Para esses sistemas, a regra que determina a transição entre estados sucessivos é probabilística.

### 2.2 Difusão em meios contínuos

#### 2.2.1 O movimento Browniano e difusão

O movimento irregular dos grãos de pólen imersos num fluido foi descoberto e caracterizado pelo botânico inglês Robert Brown em 1827. Investigações experimentais subsequentes, apoiadas no desenvolvimento de técnicas de microscopia, revelaram que o fenômeno é bem mais geral, ocorrendo em suspensões de diversos tipos de partículas microscópicas em fluidos não muito viscosos. As primeiras teorias sobre o movimento browniano, publicadas independentemente por Einstein (1905) e Smoluchowski (1906),

representam aplicações de sucesso das ideias atomísticas da teoria cinética dos gases [Salinas 2006].

O movimento browniano é modelado por uma equação de difusão. Para obter essa equação, recorre-se à equação de Fokker-Planck. Esta última é, em essência, uma forma simplificada da equação mestra, aplicável quando o sistema pode ser descrito por um espaço de estados contínuos, onde as transições entre estados são consideradas infinitesimais. Tal simplificação é formalmente realizada através da expansão da equação mestra em séries de Taylor, resultando na equação de Fokker-Planck [Kampen 1992]. A evolução temporal da probabilidade associada a sistemas com espaço de estados contínuos pode ser descrita pela equação mestra [Kampen 1992]:

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \int \{T_{y' \rightarrow y} P(y', t) - T_{y \rightarrow y'} P(y, t)\} dy', \quad (2.2)$$

sendo  $T_{y' \rightarrow y}$  a taxa de transição do estado  $y'$  para o estado  $y$  e  $P(y', t)$  a probabilidade de encontrar o sistema no estado  $y'$  no tempo  $t$ . Quando possuímos transições de estados com saltos muito pequenos, a equação (2.2) pode ser expandida em séries de Taylor, resultando na equação de Fokker-Planck [Kampen 1992]

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = -\frac{\partial[A_1(y)P(y, t)]}{\partial t} + \frac{\partial^2[A_2(y)P(y, t)]}{\partial y^2}. \quad (2.3)$$

Na ausência de forças externas,  $A_1(y) = 0$  e  $A_2(y) = D$ , resultando na equação de difusão unidimensional sem direção preferencial

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P(y, t)}{\partial x^2}. \quad (2.4)$$

## 2.2.2 Difusão com resetting

A reinicialização estocástica é um processo bastante comum na vida cotidiana. Considere procurar por algum alvo novo, como, por exemplo, um rosto na multidão ou as chaves perdidas de alguém em casa. Uma tendência natural é, depois de procurar sem sucesso, retornar ao ponto de partida e recomeçar a busca. De forma análoga, o resetting pode ser incluído na equação (2.4) para fins de estudo da reinicialização em um processo de difusão de partículas, nos levando à equação da difusão unidimensional com resetting [Evans e Majumdar 2011]:

$$\frac{\partial P(y, t|y_0)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P(y, t|y_0)}{\partial y^2} - rP(y, t|y_0) + r\delta(y - y_0), \quad (2.5)$$

onde  $r$  a taxa de resetting,  $y_0$  a posição inicial da partícula e também de resetting,  $-rP(y, t|y_0)$  um termo de remoção da probabilidade por conta do caráter de reset aleatório e  $r\delta(y - y_0)$  uma compensação da remoção, caso,  $y = y_0$ . Pois, se  $y \neq y_0$  temos que  $\delta(y - y_0) = 0$  e, obviamente, não há o que compensar.

Sabendo que a difusão tem o caráter de propagar as partículas pelo espaço e o resetting acaba por atraí-las para uma posição  $y_0$ , para tempos muito longos, a equação (2.7) acaba por assumir a forma estacionária:

$$D \frac{d^2 P(y)}{dy^2} - rP(y) + r\delta(y - y_0) = 0, \quad (2.6)$$

já que  $\frac{\partial P(y, t \rightarrow \infty)}{\partial t} = 0$ . Assim, a equação (2.6) possui como solução

$$P(y) = \frac{\alpha_0}{2} e^{-\alpha_0 |y - y_0|}, \quad (2.7)$$

onde  $\alpha_0 = \sqrt{\frac{r}{D}}$ , isso indica que a distribuição de probabilidade estacionária decai exponencialmente à medida que a distância a  $y_0$  aumenta. Isso ocorre porque a partícula tende a retornar para perto de  $y_0$  devido ao efeito de reinicialização. [Evans e Majumdar 2011].

### 2.2.3 Tempo médio de primeira passagem (MFPT)

Vamos estudar o problema de primeira passagem, caracterizado pela chegada de uma partícula browniana à origem por um processo de difusão com resetting. Considerando a origem como um alvo, no qual a partícula pode acessar via difusão ou pelo mecanismo de reinicialização. [Evans e Majumdar 2011]. O problema de primeira passagem é melhor formulado em termos da equação de Fokker-Planck inversa, pois a mesma relaciona-se com a posição inicial de forma direta. A equação de Fokker-Planck inversa é dada por:

$$\frac{\partial Q(y, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 Q(y, t)}{\partial y^2} - rQ(y, t) + rQ(y_0, t), \quad (2.8)$$

onde  $Q(y, t)$  é a probabilidade de sobrevivência, que é a probabilidade de que uma partícula difusora ainda não tenha encontrado o alvo até um instante de tempo  $t$ . Para resolver a equação (2.8), utilizamos o método da transformada de Laplace em relação ao tempo, definindo  $q(y, s) = \int_0^\infty dt e^{-st} Q(y, t)$ . Aplicando a transformada no lado esquerdo da equação (2.8), temos:

$$\mathcal{L} \left\{ \frac{\partial Q(y, t)}{\partial t} \right\} = \int_0^\infty dt e^{-st} \frac{\partial Q(y, t)}{\partial t}. \quad (2.9)$$

Integrando a equação (2.9) por partes, com  $u = e^{-st}$  e  $dv = \frac{\partial Q(y, t)}{\partial t}$ , temos:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} \left\{ \frac{\partial Q(y, t)}{\partial t} \right\} &= e^{-st} Q(y, t) \Big|_0^\infty + s \int_0^\infty dt e^{-st} Q(y, t) \\ &= sq(y, s) - Q(y, 0) \\ &= sq(y, s) - 1, \end{aligned} \quad (2.10)$$

onde a condição inicial  $Q(y, 0) = 1$  é necessária, pois, em  $t = 0$ , a probabilidade de sobrevivência assume o seu maior valor. A transformada de Laplace no termo de difusão

nos dá  $\mathcal{L}\left\{D\frac{\partial^2 Q(y,t)}{\partial y^2}\right\} = D\frac{\partial^2 q(y,t)}{\partial y^2}$ . Assim, temos a equação diferencial em termos de uma nova variável  $s$

$$sq(y,s) - 1 = D\frac{\partial^2 q(y,s)}{\partial y^2} - rq(y,s) + rq(y_0,s). \quad (2.11)$$

A solução homogênea da equação (2.11)

$$D\frac{\partial^2 q(y,s)}{\partial y^2} - (s+r)q(y,s) = 0, \quad (2.12)$$

é dada por:

$$q_h(y,s) = Ae^{\alpha y} + Be^{-\alpha y}, \quad (2.13)$$

com  $\alpha = \sqrt{(r+s)/D}$ . A solução particular, que não dependerá explicitamente de  $y$ , deve ser:

$$sq_p - 1 = -rq_p + rq_p(y_0,s), \quad (2.14)$$

logo,

$$q_p = \frac{1 + rq(y_0,s)}{r+s}. \quad (2.15)$$

Somando a solução homogênea (2.13) com a solução particular (2.15), temos:

$$q(y,s) = Ae^{\alpha y} + Be^{-\alpha y} + \frac{1 + rq(y_0,s)}{r+s}. \quad (2.16)$$

Para que a equação (2.16) não divirja em  $y \rightarrow \infty$ , fazemos  $A = 0$ . Para que a probabilidade de sobrevivência seja consistente com as condições de contorno, devemos ter  $q(0,s) = 0$ , ou seja, na posição inicial a probabilidade de sobrevivência é nula. A aplicação destas condições nos leva à equação:

$$q(y_0,s) = \frac{1 + rq(y_0,s)}{r+s} [e^{-\alpha y_0} - 1], \quad (2.17)$$

que após uma manipulação algébrica simples, nos leva a:

$$q(y_0,s) = \frac{1 - e^{-\alpha y_0}}{s + re^{-\alpha y_0}}. \quad (2.18)$$

Assim, chegamos a uma expressão que evidencia a probabilidade de sobrevivência de uma partícula começando em  $y_0$ . Entretanto, é necessário que conectemos a probabilidade de sobrevivência com o MPFT. Sabendo que o MPFT é dado por [Evans e Majumdar 2011]:

$$T(y_0) = \int_0^\infty tf(y_0,t)dt, \quad (2.19)$$

onde

$$-\frac{\partial Q(y_0,t)}{\partial t} = f(y_0,t). \quad (2.20)$$

Substituindo a equação (2.20) em (2.19), temos

$$T(y_0) = -\int_0^\infty t\frac{\partial Q(y_0,t)}{\partial t}dt. \quad (2.21)$$

Integrando por partes, com  $u = t$  e  $dv = -\frac{\partial Q(y,t)}{\partial t}$ , temos:

$$\begin{aligned} T(y_0) &= -tQ(y_0, t) \Big|_0^\infty + \int_0^\infty Q(y_0, t) dt \\ &= \int_0^\infty Q(y_0, t) dt, \end{aligned} \quad (2.22)$$

tendo em vista que o termo  $Q(y_0, t)$  decai muito depressa quando  $t \rightarrow \infty$ . Sabendo que a transformada de Laplace para  $q(y_0, s) = \int_0^\infty dt e^{-st} Q(y_0, t)$ , com  $s = 0$  é

$$q(y_0, 0) = \int_0^\infty Q(y_0, t) dt, \quad (2.23)$$

temos

$$q(y_0, 0) = T(y_0). \quad (2.24)$$

Agora, finalmente, podemos substituir  $s = 0$  na equação (2.17) e obter o MFPT para um processo estocástico, difusivo, unidimensional, com resetting e espaços de estados contínuos [Evans e Majumdar 2011]:

$$T(y_0) = \frac{1}{r} [e^{\alpha y_0} - 1]. \quad (2.25)$$

É possível ainda expandir a equação (2.25) em série de Taylor em torno de  $r = 0$  e observar o comportamento quando consideramos valores de  $r$  muito pequenos. Considerando  $x = \alpha y_0$  e a expansão em série de Taylor da exponencial

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}. \quad (2.26)$$

Desprezando termos de ordem superior a  $x^2$

$$\begin{aligned} e^x &= 1 + x + \frac{x^2}{2} + O(x^3) \\ &= 1 + \alpha y_0 + \frac{\alpha^2 y_0^2}{2} \\ &= 1 + \sqrt{\frac{r}{D}} y_0 + \frac{r y_0^2}{2D}, \end{aligned} \quad (2.27)$$

substituindo a equação (2.27) em (2.25) temos:

$$\begin{aligned} T(y_0) &\approx \frac{1}{r} \left[ 1 + \sqrt{\frac{r}{D}} y_0 + \frac{r y_0^2}{2D} - 1 \right] \\ &\approx \frac{y_0}{\sqrt{rD}} + \frac{y_0^2}{2D}, \end{aligned} \quad (2.28)$$

O termo  $\frac{y_0}{\sqrt{rD}}$  se torna dominante quando  $r \rightarrow 0$ , ou seja, o MFPT é proporcional ao inverso da raiz quadrada de  $r$ ,  $T(y_0) \propto r^{-1/2}$ . Este comportamento é esperado, pois acaba-se por recuperar o comportamento difusivo sem resetting para o qual o MFPT diverge.

### 2.2.4 A inclusão de limites absorventes

Considerando a difusão de uma partícula browniana em um intervalo unidimensional  $[a, b]$ , onde as extremidades desse intervalo são absorventes. Os pontos  $a$  e  $b$  são pontos que, se a partícula difusora atingir, será absorvida e assim encerra-se a dinâmica. Chamamos as duas extremidades de alvos ou resultados possíveis para limites de tempos longos. Pode-se, por exemplo, considerar a absorção em  $a$  como um resultado indesejado, enquanto a absorção em  $b$  como um sucesso. O sistema se reinicializa se, após algum tempo  $T$ , a partícula não tenha sido absorvida ainda. Se o processo subjacente for concluído antes do reset, o processo termina imediatamente. Caso contrário, a reinicialização ocorre: a partícula é levada de volta para  $y_0$  e a dinâmica é reinicializada [Pal e Prasad 2019].

No contexto da dinâmica de renovação, a probabilidade de sobrevivência  $Q(y_0, t)$  da equação 2.20 é a probabilidade de que a partícula não tenha atingido nenhum dos limites até um tempo  $t$ , considerando o resetting para  $y_0$  a uma taxa  $r$  [Pal e Prasad 2019]. Desta forma, podemos reescrever a equação (2.16) em termos de funções hiperbólicas

$$q(y, s) = E \sinh(\alpha y) + F \cosh(\alpha y) + \frac{1 + rq(y_0, s)}{r + s}. \quad (2.29)$$

Aplicando as condições de contorno  $q(a, s) = q(b, s) = 0$  na equação (2.29), obtemos um sistema linear de equações que pode ser escrito na forma matricial abaixo

$$\begin{bmatrix} \sinh(\alpha c) & \cosh(\alpha c) \\ \sinh(\alpha d) & \cosh(\alpha d) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E \\ F \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{1 + rq(y_0, s)}{r + s} \\ -\frac{1 + rq(y_0, s)}{r + s} \end{bmatrix}. \quad (2.30)$$

Resolvendo o sistema linear (2.30) com  $y = y_0$ , obtemos a expressão para a probabilidade de sobrevivência em termos do parâmetro  $s$  da transformada de Laplace [Pal e Prasad 2019]:

$$q(y_0, s) = \frac{1 - g(y_0, s)}{s + rg(y_0, s)}, \quad (2.31)$$

onde

$$g(y_0, s) = \frac{\sinh(b - y_0)\alpha + \sinh(y_0 - a)\alpha}{\sinh(b - a)\alpha}, \quad (2.32)$$

recuperando o resultado obtido da equação (2.18) da seção anterior para uma cadeia semi-infinita com um estado absorvedor, fazendo  $a = 0$  e  $b \rightarrow \infty$ . Substituindo  $a = 0$  na equação (2.32), temos:

$$g(y_0, s) = \frac{\sinh(b - y_0)\alpha + \sinh(y_0)\alpha}{\sinh(b)\alpha}. \quad (2.33)$$

Sabendo que a função trigonométrica hiperbólica do seno é:

$$\sinh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2}, \quad (2.34)$$

e que para valores de  $x$  muito grandes, temos

$$\sinh(x) \approx \frac{e^x}{2}, \quad (2.35)$$

substituindo a equação (2.35) em (2.33), temos:

$$\begin{aligned} g(y_0, s) &= \frac{e^{b-y_0} + e^{y_0} - e^{-y_0}}{e^b} \\ &= e^{-y_0} + e^{y_0-b} - e^{-(y_0+b)}, \end{aligned} \quad (2.36)$$

como  $b \rightarrow \infty$ , nos resta:

$$g(y_0, s) = e^{-y_0}. \quad (2.37)$$

Ao substituirmos a equação (2.37) em (2.31) recuperamos a equação (2.18). Portanto, concluímos que a difusão em uma cadeia semi-infinita com uma fronteira absorvente na origem, equação (2.37), é um caso particular da difusão em um intervalo finito com extremidades absorvedoras, equação (2.31).

## 2.2.5 Otimização da taxa de resetting

A inclusão do resetting em um processo de busca permite otimizá-lo, identificando uma taxa de resetting ideal  $r^*$  que minimize o Tempo Médio de Primeira Passagem (MFPT). Para um espaço de estados contínuo, temos a equação (2.25) que define o MFPT, onde é possível obter-se uma taxa de resetting otimizada igualando a primeira derivada do MFPT em relação a  $r$  a zero [Evans e Majumdar 2011]:

$$\frac{dT}{dr} = 0. \quad (2.38)$$

Definindo uma nova variável adimensional  $z \equiv \sqrt{\frac{r}{D}}y_0$ , temos

$$r = \frac{z^2 D}{y_0^2}. \quad (2.39)$$

Substituindo a equação (2.39) em (2.25), temos

$$T(z) = \frac{y_0^2}{z^2 D} [e^z - 1]. \quad (2.40)$$

A taxa de resetting ótima  $r^*$ , agora é obtida através de  $z^*$  que minimiza  $T(z)$ . Derivando a equação (2.40) em relação a  $z$ , temos:

$$\begin{aligned} &\frac{y_0^2}{D} \frac{d}{dz} \left[ \frac{e^z - 1}{z^2} \right] \\ &= \frac{y_0^2}{D} \left[ \frac{2 - 2e^z}{z} + e^z \right]. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Igualando a equação (2.41) a zero, obtemos a seguinte equação transcendental

$$\frac{z^*}{2} = 1 - e^{-z^*}, \quad (2.42)$$

cuja solução numérica é  $z^* = 1.59362 \dots$ . Desta forma, temos uma taxa de resetting otimizada dada por  $r^* = \frac{D(z^*)^2}{y_0^2}$ , que minimiza o tempo de busca para encontrar o alvo na origem numa busca unidimensional [Evans e Majumdar 2011]. Percebe-se que a equação da taxa de resetting otimizada é inversamente proporcional a  $y_0^2$ , ou seja, quanto maior for a distância da posição de resetting com relação ao alvo, menor será a taxa  $r^*$ . Esse resultado faz sentido já que, do ponto de vista de um problema de otimização, quanto maior a distância da posição de reinicialização ao alvo, deveríamos reinicializar a busca com menos frequência.

No Capítulo 3, abordaremos a formulação de um modelo de cadeia linear com sítios e transições discretas. Para tanto, utilizaremos técnicas comumente utilizadas no estudo de sistemas quânticos de muitos corpos como o formalismo do espaço de Fock e operadores tipo escada de criação e aniquilação.

## 3 Metodologia

Neste capítulo, apresentamos conceitos que serão úteis para uma compreensão sobre processos de difusão e reinicialização. Incluímos uma discussão sobre processos Markovianos. Introduzimos as redes de Petri estocásticas e os diagramas de Feynman com o objetivo de fornecer representações visuais e qualitativas para processos estocásticos. Na sequência, abordamos uma formulação de segunda quantização adaptada ao contexto estocástico. Por fim, estudaremos a difusão como um processo de busca aleatória onde o MFPT pode vir a ser otimizado.

### 3.1 Processos Markovianos

Sistemas dinâmicos com aleatoriedade intrínseca podem ser classificados como sistemas Markovianos, caracterizados pela “ausência de memória”, em que o estado futuro depende exclusivamente do estado atual. A probabilidade de transição entre estados  $j \rightarrow i$  é dada pela probabilidade condicional [Ross 1996]:

$$P\{X(t+s) = i | X(s) = j\}, \quad (3.1)$$

onde  $X(t)$  pode ser interpretada como uma variável aleatória implícita que representa a posição da partícula, ou seja, ela não é uma função descrita no sentido determinístico. A variável  $s$  é de tempo adicional, e  $j$  e  $i$  representam os estados do sistema, onde a transição será  $j \rightarrow i$ .

Denominamos de matriz de transição a uma matriz quadrada que descreve todas as probabilidades de transição entre estados possíveis. Probabilidades condicionais do tipo (3.1) podem ser interpretadas como elementos desta matriz. No formalismo do espaço de Fock, a matriz de transição é obtida via  $e^{-Ht}$ , onde  $H$ , é uma matriz formada pelas taxas de transição entre os estados.

$$e^{-Ht} = \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & P_{13} & \cdots & P_{1n} \\ P_{21} & P_{22} & P_{23} & \cdots & P_{2n} \\ P_{31} & P_{32} & P_{33} & \cdots & P_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ P_{n1} & P_{n2} & P_{n3} & \cdots & P_{nn} \end{bmatrix}. \quad (3.2)$$

A soma de todas as colunas deve ser igual a 1, já que a soma das probabilidades de transição, partindo de uma configuração  $j$  para qualquer outra configuração do sistema, deve ser igual a 1, garantindo que as colunas estejam devidamente normalizadas. Assim:

$$\sum_i P_{ij} = 1 \quad \forall j. \quad (3.3)$$

Um exemplo de comportamento Markoviano na difusão clássica em cadeias lineares pode ser visto na Figura 5, onde as partículas podem realizar saltos discretos entre os sítios vizinhos, mas podem também ser resetadas através de uma taxa  $R$  para um determinado sítio específico  $r$  (sítio de resetting).

## 3.2 A rede de Petri estocástica

No ano de 1962, em sua tese de doutorado, Carl Adam Petri propôs um modelo matemático original com a potencialidade de formalizar processos complexos que necessitavam da presença de sincronicidade e paralelismo entre cada componente [Petri 1962]. Sabendo que os eventos discretos podem ocorrer de forma paralela, ou seja, não necessariamente de forma sequencial, as redes de Petri acabam por ser uma ferramenta útil para descrever visualmente sistemas físicos como os da difusão clássica em cadeias lineares. Além disto, as redes de Petri estocástica são uma das muitas linguagens diagramáticas que foram desenvolvidas para o estudo de sistemas complexos [Baez e Biamonte 2018].

Em termos formais, uma rede de Petri estocástica possui duas definições. A primeira consiste em um conjunto  $S$  de espécies e um conjunto  $T$  de transições, juntamente com uma função:

$$i : S \times T \rightarrow \mathbb{N}, \quad (3.4)$$

informando-nos quantas cópias discretas (tokens) de cada espécie aparecem como entrada para cada transição e uma função:

$$o : S \times T \rightarrow \mathbb{N} \quad (3.5)$$

informando-nos quantas vezes as cópias discretas aparecem como saída. Os tokens são marcadores unitários, posicionados nas espécies  $S$ , indicando as ocupações na rede [Bause e Kritzinger 2002]. No entanto, esses tokens/marcadores somente são úteis quando pretendemos representar o estado atual do sistema.

A segunda definição é:

$$r : S \times T \rightarrow (0, \infty) \quad (3.6)$$

Fornecendo uma taxa constante  $r$  para cada transição [Baez e Biamonte 2018].

Nas redes de Petri estocástica, como na Figura 1, as espécies, desenhadas por círculos, modelam as reações de difusão e resetting. Nelas, não teremos presentes os tokens (partículas), já que não estamos interessados no estado atual do sistema. As transições, desenhadas por retângulos, são responsáveis por modelar as atividades de transição. Além disso, temos as setas, que especificam a interconexão de espécies e transições, indicando assim quais objetos são alterados por uma determinada atividade [Bause e Kritzinger 2002].

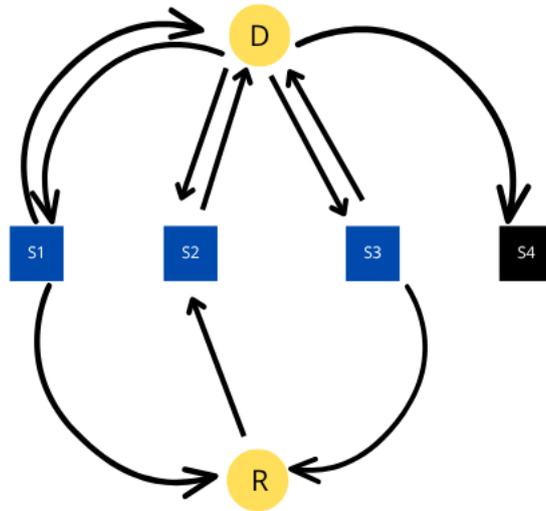


Figura 1 – Exemplo de ilustração de uma rede de Petri estocástica para um sistema de difusão clássica em cadeias lineares com resetting e um último sítio,  $S_4$  como absorvedor. Podemos notar que a cadeia possui quatro sítios e uma partícula e o sítio de resetting é o  $S_2$ . A partícula ao chegar em  $S_4$  fica aprisionada, finalizando assim o processo.

Para sistemas que envolvem múltiplas partículas, a representação da dinâmica e evolução completa do sistema por meio de uma Rede de Petri Estocástica pode apresentar limitações. Nesses casos, torna-se necessário elaborar um grafo de estados que mapeie as transições possíveis entre os diversos estados do sistema, oferecendo uma descrição mais abrangente, como podemos ver na Figura 2. Podemos interpretar as redes de Petri estocástica como um grafo bipartido. Um grafo é bipartido se o seu conjunto de vértices pode ser particionado em dois conjuntos disjuntos de modo que cada aresta une um vértice em um conjunto a um vértice em outro [Diestel 2005]. Podemos definir o conjunto dos vértices como:

$$V = \{D, R, S_1, S_2, S_3, S_4\} \quad (3.7)$$

Sendo  $V_1 = \{D, R\}$  e  $V_2 = \{S_1, S_2, S_3, S_4\}$ . Como podemos constatar, na Figura 1, não há nenhuma aresta entre os vértices de um mesmo subconjunto.

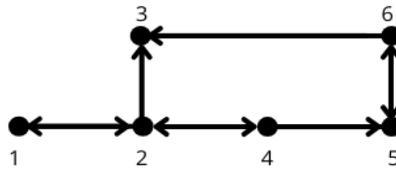


Figura 2 – Ilustração simples de um grafo de estados para uma cadeia fermiônica com quatro sítios. Neste sistema, o sítio de resetting é o primeiro, ou seja,  $r = 1$ . Estão incluídas duas partículas na cadeia. As possibilidades de estado são:  $|1\rangle = |1100\rangle$ ,  $|2\rangle = |1010\rangle$ ,  $|3\rangle = |1001\rangle$ ,  $|4\rangle = |0110\rangle$ ,  $|5\rangle = |0101\rangle$  e  $|6\rangle = |0011\rangle$ . Podemos captar, através deste grafo com direções, toda a dinâmica do sistema, de uma forma geral.

### 3.3 O diagrama de Feynman

O físico teórico norte-americano Richard Feynman introduziu os seus diagramas pela primeira vez no final da década de 1940 como um recurso contábil para simplificar cálculos extensos em uma área da física chamada de Eletrodinâmica quântica (QED) [Kaiser 2005]. A QED fornece uma descrição quântica para as forças eletromagnéticas. Em pouco tempo, os diagramas ganharam adeptos em todos os campos da física nuclear e de partículas [Kaiser 2005]. A eletrodinâmica pode ser vista de duas maneiras equivalentes e complementares. A primeira é com a descrição do comportamento de um campo (equações de Maxwell). A segunda é com a descrição de uma interação direta a uma distância (embora com atraso no tempo) entre cargas (as soluções de Lienard e Wichert) [Feynman 1949]. Podemos interpretar que os diagramas de Feynman são uma maneira de ganhar intuição sobre as interações eletromagnéticas quânticas sem a necessidade dos cálculos mais complexos que envolvem as equações de Maxwell. Entretanto, no contexto da QED introduzida por Feynman, as cargas interagem por meio de trocas envolvendo partículas mediadoras, como os fótons, por exemplo, e não através de uma interação direta, como apresentado na Figura 4.

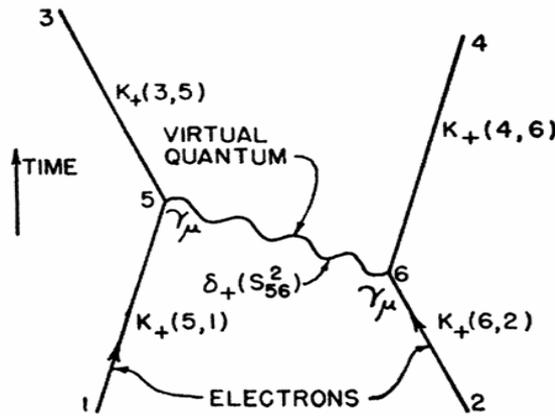


Figura 3 – Diagrama de Feynman envolvendo o espalhamento de dois elétrons por meio da troca envolvendo um fóton virtual. A notação  $K_+(4, 6)$ , por exemplo, representa uma função associada à propagação do elétron, do vértice 6 até o ponto 4. Os vértices representam os pontos de interação direta, neste caso, com um fóton virtual. Desta forma, o elétron que vem da reta 1 emite um fóton virtual no vértice 5 que será absorvido pelo elétron 2 no vértice 6, posteriormente, os elétrons serão espalhados. O sinal + na função  $K_+(j, k)$  pode ser interpretado que esta função de propagação possui sentido positivo em relação ao eixo temporal. Esta figura foi extraída da bibliografia referenciada em [Feynman 1949].

Podemos interpretar também que os diagramas de Feynman são como uma “soma sobre histórias”. No contexto da QED, estas histórias estão associadas às amplitudes de probabilidades presentes na mecânica quântica. Entretanto, podemos utilizar estes diagramas no contexto das probabilidades de transição e assim introduzi-los no contexto do nosso problema de difusão clássica em cadeias lineares com resetting.

Feynman utilizou a ideia de uma soma sobre histórias no contexto da teoria quântica de campos. Na época, essa ideia parecia bastante alucinante, por vários motivos. Primeiro, envolvia partículas elementares. Segundo, envolvia amplitudes complexas ao invés de probabilidades reais. Terceiro, envolvia integrais ao invés de somas. E quarto, muitas dessas integrais divergiam, dando infinitas respostas que precisavam ser “corrigidas” de alguma forma [Baez e Biamonte 2018]. No entanto, podemos aproveitar a ideia dos diagramas de uma forma mais simples, ou seja, sem necessitar das características quânticas das partículas.

Sabendo que cada diagrama de Feynman representa uma possível história do comportamento do sistema, podemos expressar a “soma sobre histórias” através de uma expansão em série de Taylor de  $e^{-H_\gamma t}$ . Assim, para  $|\Psi(t)\rangle = e^{-H_\gamma t} |\Psi(0)\rangle$ , teremos:

$$|\Psi(t)\rangle = |\Psi(0)\rangle - tH_\gamma |\Psi(0)\rangle + \frac{t^2}{2} H_\gamma^2 |\Psi(0)\rangle + \dots, \quad (3.8)$$

onde cada termo pode ser interpretado como um diagrama que representa uma possível história do sistema. Assim, o número de caminhos (trajetórias) para concluir um processo estocástico é infinito. No entanto, podemos representar alguns desses caminhos como

diagramas de Feynman. Um exemplo de diagrama de Feynman para a difusão clássica em cadeias lineares pode ser visto na Figura 3.

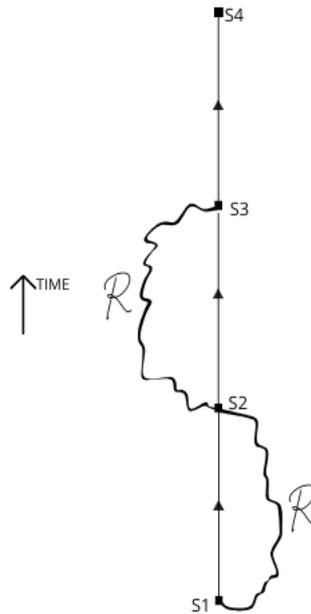


Figura 4 – Ilustração de um diagrama de Feynman para uma cadeia linear composta por uma partícula em quatro sítios, sendo  $S2$  o sítio de reinicialização e  $S4$  o absorvedor. A cadeia possui um viés no sentido do último sítio. A partícula inicia-se no sítio  $S1$  e pode ser resetada a qualquer momento por meio de uma taxa  $R$  para o sítio  $S2$ . As curvas onduladas representam os eventos de resetting e as retas são processos de difusão entre os sítios(vértices). Esse diagrama representa uma possível história do sistema.

### 3.4 Formalismo do espaço de Fock e operadores de segunda quantização em problemas de difusão clássica

Nesta seção, apresentamos uma formulação da difusão clássica em cadeias lineares com processos de reinicialização utilizando técnicas comumente utilizadas em problemas de mecânica quântica. O suporte teórico principal utilizado foi o uso de técnicas da mecânica quântica aplicada à mecânica estocástica. Sendo assim, é de suma importância conhecer tais técnicas para compreender como chegamos à um operador com reinicialização, cuja evolução temporal é dada pela equação (3.2), que será utilizado para a obtenção dos resultados obtidos nesta dissertação

#### 3.4.1 Técnicas quânticas na Mecânica Estocástica

É importante destacar que a difusão que estamos tratando neste trabalho é clássica, entretanto, isto não nos impede de utilizar as ferramentas da mecânica quântica como

suporte matemático para descrevê-la. Não é imprescindível o domínio da teoria quântica para a aplicação das técnicas a ela associadas em processos de difusão clássicos. Utilizamos a Ref. [Baez e Biamonte 2018] para introduzir essas técnicas no problema de difusão com reinicialização.

### 3.4.1.1 Operadores de criação e aniquilação

Na mecânica quântica, temos o operador de criação  $\hat{a}^\dagger$  responsável por gerar estados na forma  $\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$ , levando o estado para um nível mais excitado, e o operador de aniquilação  $\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$  levando o estado para um nível menor de energia. Os operadores que iremos utilizar são similares a esses e podemos colocá-los dentro do contexto da difusão clássica em cadeias lineares, onde  $n$ , ao invés de ser um número quântico, será o número de ocupação em cada sítio de uma cadeia. O operador de criação é definido como:

$$\alpha^\dagger |n\rangle = |n+1\rangle, \quad (3.9)$$

já o de aniquilação será:

$$\alpha |n\rangle = n |n-1\rangle. \quad (3.10)$$

Para  $n$  partículas em um sítio específico da cadeia, a aplicação do operador de criação em  $|n\rangle$  cria uma nova partícula e há apenas uma maneira de fazer isso, nos levando à equação (3.9), entretanto, a aplicação do operador de aniquilação em  $|n\rangle$  nos dá  $n$  maneiras diferentes de aniquilar uma partícula, nos levando à equação (3.10) [Baez e Biamonte 2018].

Suponhamos, por exemplo, o processo de difusão de duas partículas em uma cadeia que possui quatro sítios. Um estado possível para esta cadeia é  $|0020\rangle$ . Se quisermos aplicar o operador de aniquilação no terceiro sítio deste estado e aplicar o de criação no segundo, faremos isto de forma que  $\alpha_2^\dagger \alpha_3 |0020\rangle = 2\alpha_2^\dagger |0010\rangle = 2|0110\rangle$ , onde  $|0110\rangle$  é um novo estado possível após a operação e 2 é a quantidade de formas possíveis que isso pode ocorrer.

Os operadores de criação e aniquilação estocásticos não comutam,  $[\alpha, \alpha^\dagger] = 1$  [Baez e Biamonte 2018]. Para melhor entendimento, vamos supor, por absurdo, que estes operadores comutam, ou seja,  $[\alpha, \alpha^\dagger] = 0$ , assim:

$$\alpha\alpha^\dagger - \alpha^\dagger\alpha = 0,$$

logo

$$\alpha\alpha^\dagger = \alpha^\dagger\alpha. \quad (3.11)$$

Aplicando o lado esquerdo da equação (3.11) em um estado  $|n\rangle$ , temos:

$$\alpha\alpha^\dagger |n\rangle = \alpha |n+1\rangle = (n+1) |n\rangle, \quad (3.12)$$

e ao aplicar o lado direito em um mesmo estado  $|n\rangle$  temos

$$\alpha^\dagger \alpha |n\rangle = n \alpha^\dagger |n-1\rangle = n |n\rangle. \quad (3.13)$$

Ou seja, podemos concluir que a ordem de aplicação destes operadores influencia no resultado final; portanto, não comutam.

### 3.4.1.2 Mapeamento da equação mestra em uma equação tipo Schrödinger

Como o nosso problema trata-se de um sistema que evolui no tempo de forma probabilística, a solução da equação mestra nos dá a probabilidade  $P(\eta, t)$  de encontrar o sistema em um estado  $\eta$  em um determinado tempo  $t$ . A equação mestra é equivalente à equação de Chapman-Kolmogorov para processos Markovianos e a sua dedução pode ser vista em [Kampen 1992]. Esta equação é definida como:

$$\frac{\partial P(\eta, t)}{\partial t} = \sum_{\eta'} T_{\eta' \rightarrow \eta} P(\eta', t) - T_{\eta \rightarrow \eta'} P(\eta, t), \quad (3.14)$$

onde  $T_{\eta' \rightarrow \eta}$  é a taxa de transição do estado  $\eta'$  para  $\eta$  e  $T_{\eta \rightarrow \eta'}$  é a taxa de transição contrária. O lado esquerdo da equação (3.14) indica como a probabilidade  $P(\eta, t)$  muda com o tempo, já o primeiro termo do lado direito indica o aumento da probabilidade de encontrar o sistema no estado  $\eta$  devido à transição  $\eta' \rightarrow \eta$  e o segundo indica a diminuição da probabilidade de encontrar o sistema no estado  $\eta$  devido à transição  $\eta \rightarrow \eta'$ .

Sabendo que  $|\Psi(t)\rangle$  é um determinado estado do sistema, a equação mestra pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = -H_\gamma |\Psi(t)\rangle, \quad (3.15)$$

onde  $H_\gamma$  é o operador Quasi-Hamiltoniano do sistema, que por sua vez, não é hermiteano. Essa equação é similar à equação de Schrödinger com  $i\hbar = 1$  [Duarte-Filho, Santos e Gaffney 2020], cuja solução pode ser formalmente escrita da seguinte forma

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-H_\gamma t} |\Psi(0)\rangle. \quad (3.16)$$

### 3.4.1.3 Propriedades de $H_\gamma$

Para identificar a matriz  $H_\gamma$  como estocástica é necessário que ela satisfaça algumas condições, sendo que a primeira trata-se da necessidade de que a soma das colunas seja igual a zero, ou seja:

$$\sum_i H_{ij} = 0, \quad \forall j. \quad (3.17)$$

Vamos supor, por absurdo, que seja possível haver soma de elementos de colunas que seja diferente de zero, tal que:

$$\sum_i H_{ij} = \delta_j, \quad (3.18)$$

onde  $\delta_j$  é um número real qualquer. Sabemos também que podemos escrever o vetor de estado em termos das probabilidades como:

$$|\Psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} P_1(t) \\ P_2(t) \\ \vdots \\ P_n(t) \end{pmatrix}, \quad (3.19)$$

já o quasi-hamiltoniano como:

$$H_\gamma = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \dots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22} & \dots & H_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{n1} & H_{n2} & \dots & H_{nn} \end{pmatrix}. \quad (3.20)$$

Substituindo as equações (3.19) e (3.20) na equação (4.37), podemos extrair o sistema de equações:

$$\begin{cases} \frac{\partial P_1(t)}{\partial t} = -[H_{11}P_1(t) + H_{12}P_2(t) + \dots + H_{1n}P_n(t)] \\ \frac{\partial P_2(t)}{\partial t} = -[H_{21}P_1(t) + H_{22}P_2(t) + \dots + H_{2n}P_n(t)] \\ \vdots \\ \frac{\partial P_n(t)}{\partial t} = -[H_{n1}P_1(t) + H_{n2}P_2(t) + \dots + H_{nn}P_n(t)] \end{cases} \quad (3.21)$$

Somando todas as derivadas parciais de 3.21, podemos escrever:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(P_1(t) + P_2(t) + \dots + P_n(t))}{\partial t} &= -[\delta_1 P_1(t) + \delta_2 P_2(t) + \dots + \delta_n P_n(t)] \\ &= -\sum_n \delta_n P_n(t). \end{aligned} \quad (3.22)$$

A equação (3.22) não é consistente, pois ela nos obriga a concluir que a soma das probabilidades é uma função dependente do tempo, levando à não garantia da normalização das probabilidades, ou seja, a única forma de obtermos  $\sum_n P_n(t) = 1$  é assumindo que todos os deltas são iguais a zero, validando assim a equação (3.17). Além de termos as somas das colunas iguais a zero, a diagonal principal da matriz deve ser sempre positiva [Baez e Biamonte 2018].

#### 3.4.1.4 A difusão clássica em cadeias lineares

Até o momento, já mencionamos o que é necessário para a obtenção do nosso quasi-hamiltoniano, que são os operadores de criação e aniquilação, o mapeamento da equação mestra em uma equação tipo Schrödinger e as condições que a matriz estocástica

precisa satisfazer. Considerando a difusão clássica em cadeias lineares, o Hamiltoniano correspondente a uma cadeia de  $k$  sítios é apresentado como:

$$H_\gamma = - \sum_{j=1}^{k-1} (D_{j \rightarrow j+1} h_{j \rightarrow j+1}^\gamma + D_{j+1 \rightarrow j} h_{j+1 \rightarrow j}^\gamma), \quad (3.23)$$

com

$$h_{j \rightarrow j+1}^\gamma = (\alpha_{j+1}^\dagger - \alpha_j^\dagger) \alpha_j + \gamma \alpha_j^\dagger \alpha_j \alpha_{j+1}^\dagger \alpha_{j+1}. \quad (3.24)$$

A equação (3.23) contém as informações acerca de uma cadeia linear com  $k$  sítios onde as partículas (férmions ou bósons) podem realizar saltos para os sítios vizinhos, ou seja,  $j \rightarrow j+1$  ou  $j+1 \rightarrow j$  com taxas  $D_{j \rightarrow j+1}$  ou  $D_R$  para a direita e  $D_{j+1 \rightarrow j}$  ou  $D_L$  para a esquerda.

Podemos interpretar cada termo da equação (3.24) da seguinte forma:

$$h_{j \rightarrow j+1}^\gamma = \alpha_{j+1}^\dagger \alpha_j - \alpha_j^\dagger \alpha_j + \gamma \alpha_j^\dagger \alpha_j \alpha_{j+1}^\dagger \alpha_{j+1}, \quad (3.25)$$

onde o primeiro termo da equação (3.25) representa a difusão das partículas na cadeia, o segundo é o operador número ou correção, o qual quando é aplicado em um determinado estado, produz um autovalor que contará quantas partículas há em um determinado sítio, já o terceiro termo é a exclusão de volume, onde  $\gamma = 0$  para bósons e  $\gamma = 1$  para férmions. O termo de exclusão de volume deve ser incluído para o caso de cadeias com férmions, ou seja, cadeias que possuem a restrição da não possibilidade de ocupação por mais de uma partícula no mesmo sítio.

Para o estudo da estatística de primeira passagem, é possível “aprisionar” uma partícula que atinge o último sítio da cadeia, o qual é chamado de sítio absorvedor removendo o termo que corresponde aos saltos para a esquerda entre as caixas  $k$  e  $k-1$  na equação 3.23 [Duarte-Filho, Santos e Gaffney 2020]. Assim:

$$H'_\gamma = -D_R \sum_{j=1}^{k-1} h_{j \rightarrow j+1}^\gamma - D_L \sum_{j=1}^{k-2} h_{j+1 \rightarrow j}^\gamma. \quad (3.26)$$

### 3.5 Obtenção do quasi-hamiltoniano com reinicialização

Para obter o nosso quasi-Hamiltoniano para o problema de difusão clássica em cadeias lineares com resetting, podemos realizar uma soma de matrizes:

$$H_\gamma^R = H_\gamma + H_R. \quad (3.27)$$

Onde  $H_\gamma$  nós já conhecemos e  $H_R$  é a nossa matriz de resetting que precisamos definir. Antes de mostrarmos como é esta matriz, é importante saber que o sistema com o qual vamos tratar caracteriza-se pela difusão das partículas fermiônicas entre os sítios vizinhos; entretanto, as partículas podem ser resetadas para um determinado sítio de resetting  $r$  através de uma taxa  $R$ , como na Figura 5.

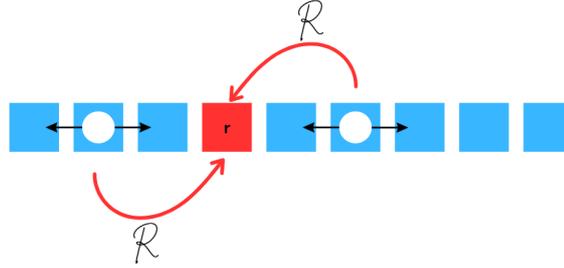


Figura 5 – Ilustração do processo de difusão com resetting para duas partículas em nove sítios com  $|\Psi\rangle = |010001000\rangle$ .

O nosso quasi-Hamiltoniano de resetting será definido como:

$$H_R = -R \sum_{j=1 \neq r}^k (\alpha_r^\dagger \alpha_j - \alpha_j^\dagger \alpha_j) - R \sum_{j=1 \neq r}^k \alpha_r^\dagger \alpha_r \alpha_j^\dagger \alpha_j, \quad (3.28)$$

onde  $\alpha_r^\dagger \alpha_j$  é o termo de dinâmica entre um determinado sítio e o sítio de resetting  $r$ ,  $\alpha_j^\dagger \alpha_j$  é o operador número de correção e  $\alpha_r^\dagger \alpha_r \alpha_j^\dagger \alpha_j$  é a exclusão de volume, que garantirá que nenhuma partícula ocupe o sítio de resetting quando este estiver ocupado.

Para fins de estudarmos a estatística de primeira passagem, vamos considerar que o sítio mais à direita é um sítio absorvedor, no qual haverá um “aprisionamento” da partícula que nele chega. Para incluir tal efeito, nós alteramos o somatório da equação 3.28 de  $k$  para  $k - 1$ , nos levando a:

$$H'_R = -R \sum_{j=1 \neq r}^{k-1} (\alpha_r^\dagger \alpha_j - \alpha_j^\dagger \alpha_j) - R \sum_{j=1 \neq r}^{k-1} \alpha_r^\dagger \alpha_r \alpha_j^\dagger \alpha_j, \quad (3.29)$$

assim, o Quasi-Hamiltoniano total com um sítio absorvedor incluído será a soma:

$$H_\gamma^R = H'_\gamma + H'_R. \quad (3.30)$$

### 3.5.1 Propriedades de $H_R$ ou $H'_R$

Nas propriedades de  $H_\gamma$ , vimos que a sua diagonal principal  $H_{ii}$  precisa ser positiva e maior do que zero, ou seja, este fato representa de quantas maneiras possíveis pode-se sair da  $i$ -ésima configuração para as demais. Já para o caso da matriz  $H'_R$ , não é necessário termos a diagonal positiva e maior que zero, pois a mesma isoladamente não representa um processo físico completo. O significado físico surge ao somá-la com a matriz de difusão, Eq. (3.27). Para uma cadeia com duas partículas em quatro sítios, por exemplo, as possibilidades de ocorrência de estados serão:  $|1\rangle = |1100\rangle$ ,  $|2\rangle = |1010\rangle$ ,

$|3\rangle = |1001\rangle, |4\rangle = |0110\rangle, |5\rangle = |0101\rangle$  e  $|6\rangle = |0011\rangle$ , onde a matriz  $H_R$  assumirá a forma:

$$H_R = \begin{pmatrix} 0 & -R & -R & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2R & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2R & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -R & 0 & 0 & 0 & -R \\ 0 & 0 & -R & 0 & 0 & -R \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2R \end{pmatrix}. \quad (3.31)$$

Podemos notar que as colunas zeradas referem-se aos estados  $|1\rangle, |4\rangle$  e  $|5\rangle$ , onde o sítio de resetting está ocupado, evidenciando a impossibilidade de transição para tais estados com a ação exclusivamente de resetting. A dinâmica exclusiva do resetting impede também que um determinado estado que possua o sítio de resetting ocupado permaneça nele próprio, ou seja, o sistema obriga-o a sair dele próprio no próximo passo.

### 3.6 Processos de busca e otimização

Qual a melhor estratégia para encontrar um objeto perdido? Qualquer pessoa que já tenha perdido chaves já enfrentou este problema. Uma situação cotidiana prototípica de problema de busca envolve entidades pesquisadoras (sejam elas pessoas, animais, organismos ou partículas) que se movem em um domínio de busca para localizar um ou mais alvos. Mesmo que seja esquemático, este problema de busca apresentado acaba sendo uma questão universal, que surge em diferentes escalas e em vários campos, e tem gerado uma quantidade crescente de trabalhos nos últimos anos, notavelmente na comunidade da física [Bénichou et al. 2011]. Um algoritmo de busca aleatória refere-se a um algoritmo que utiliza algum tipo de aleatoriedade ou probabilidade na definição do seu método (procedimento geral de busca) [Zabinsky 2010].

Iremos agora demonstrar que os processos de busca aleatória baseados em amostragem em massa (Método de Monte Carlo, por exemplo) se tornam significativamente custosos quando queremos obter um erro pequeno [Press et al. 1992]. Assim, vamos supor que queremos encontrar um  $\langle T(R) \rangle$  otimizado, utilizando para isso algum método de simulação estocástica. Desta forma, o nosso MFPT será:

$$\langle T(R) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N T_i, \quad (3.32)$$

onde  $N$  é o número de simulações. A variância de  $T(R)$  é:

$$\text{Var}[\langle T(R) \rangle] = \sigma^2 \left[ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N T_i \right]. \quad (3.33)$$

Sabemos que, sendo  $Y$  uma variável aleatória e  $\mu = E[Y]$  a sua respectiva média, com  $E[Y]$  o valor esperado, temos:

$$\text{Var}[Y] = E[(Y - \mu)^2]. \quad (3.34)$$

Assim, para  $\text{Var}[\alpha Y]$ , com  $\alpha \in \mathbb{R}$  e  $\alpha > 0$ , temos:

$$\begin{aligned}\text{Var}[\alpha Y] &= E[(\alpha Y - E[\alpha Y])^2] = E[(\alpha Y - \alpha E[Y])^2] \\ &= E[\alpha^2(Y - E[Y])^2] = \alpha^2 E[(Y - E[Y])^2] = \alpha^2 \text{Var}[Y].\end{aligned}\quad (3.35)$$

Seja  $\alpha = \frac{1}{N}$  e  $Y = \langle T(R) \rangle$ , a equação 3.33 fica:

$$\text{Var}[\langle T(R) \rangle] = \frac{1}{N^2} \text{Var} \left[ \sum_{i=1}^N T_i \right]. \quad (3.36)$$

A expressão para  $\text{Var} \left[ \sum_{i=1}^N T_i \right]$  pode ser dada como:

$$\text{Var} \left[ \sum_{i=1}^N T_i \right] = \sum_{i=1}^N \text{Var}[T_i] + 2 \sum_{i < j} \text{Cov}(T_i, T_j). \quad (3.37)$$

Entretanto, como os valores  $T_i, T_j$  são independentes, ou seja, não possuem correlação entre si, o segundo termo do lado direito da equação (3.37) será zero [ROSS 2009]. Assim, teremos:

$$\text{Var} \left[ \sum_{i=1}^N T_i \right] = \sum_{i=1}^N \text{Var}[T_i]. \quad (3.38)$$

Substituindo a equação (3.38) em (3.36), temos:

$$\text{Var}[\langle T(R) \rangle] = \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \text{Var}[T_i]. \quad (3.39)$$

Aqui, assumimos que os valores  $T_i$  são variáveis aleatórias provenientes da mesma distribuição de probabilidade, a equação (3.39) reduz-se a:

$$\text{Var}[\langle T(R) \rangle] = \frac{1}{N^2} [N(\text{Var}[T_i])^2] = \frac{(\text{Var}[T_i])^2}{N}. \quad (3.40)$$

Com a equação (3.40), podemos definir um erro  $\Delta$  para a estimativa de  $\langle T(R) \rangle$ . Este erro é

$$\Delta = \sqrt{\text{Var}[\langle T(R) \rangle]}. \quad (3.41)$$

Substituindo a equação (3.40) em (3.41), temos

$$\Delta = \frac{\text{Var}[T_i]}{\sqrt{N}}. \quad (3.42)$$

Se quisermos que o erro na estimativa de  $\langle T(R) \rangle$  seja menor do que um dado número  $\delta \ll 1$ , devemos ter:

$$N > \left[ \frac{\text{Var}[T_i]}{\delta} \right]^2, \quad (3.43)$$

ou seja, o número de simulações necessárias aumenta consideravelmente quando diminuimos  $\delta$ . Na Figura 6 podemos visualizar o quanto o número de simulações  $N$  cresce conforme diminuimos o erro desejado  $\delta$ .

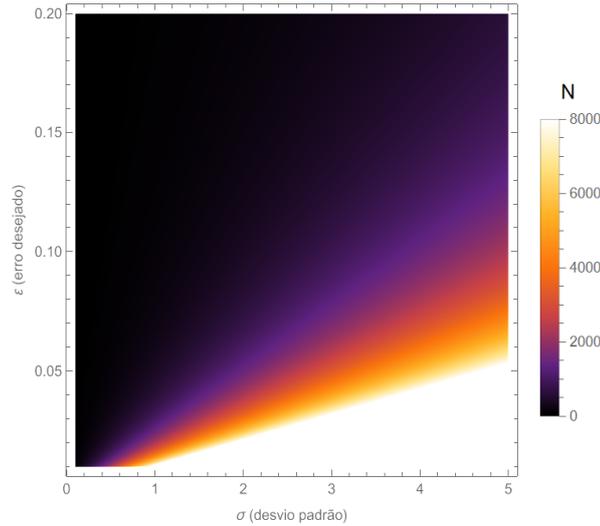


Figura 6 – Mapa de calor do número de simulações necessárias  $N$  em função do desvio padrão ( $\sigma$  ou  $\text{Var}[T_i]$ ) e do erro desejado  $\delta$ . As cores mais claras indicam onde há maiores valores para  $N$ , enquanto que as mais escuras são menores.

Através deste raciocínio, mostramos que o uso de métodos de amostragem em massa, quando estamos interessados em um erro muito pequeno, mostra-se inviável. No entanto, na Seção 4, mostraremos que o formalismo de espaço de Fock nos fornece um esquema analítico de otimização dos momentos de uma variável aleatória que evita esse problema.

### 3.6.1 A difusão como um processo de busca

O processo de difusão clássica em cadeias lineares pode ser interpretado como um processo de busca aleatória onde as partículas são os buscadores (searchers) e o sítio absorvedor é o alvo (Target) almejado. Os algoritmos de busca aleatória são frequentemente aplicados a problemas de otimização estocástica (também conhecidos como simulação-otimização), onde as funções objetivo e as restrições envolvem aleatoriedades, ou seja, o uso de algoritmos de Random Search, no contexto das funções objetivo determinísticas, é justificado pela existência de problemas em que a função objetivo é desconhecida ou com difícil análise analítica [Zabinsky 2010].

Neste trabalho, nossa função objetivo  $\langle T(R) \rangle$  será analítica com um sistema físico baseado na aleatoriedade, com processos Markovianos.

Um processo de difusão com um sítio absorvedor, quando visto como uma busca aleatória e sem o mecanismo de resetting, opera de forma não direcionada. O resetting permite a inclusão de um redirecionamento estratégico na busca. Através do resetting, podemos redirecionar o sistema e evitar que o mesmo utilize caminhos desnecessários que tornariam o MFPT mais longo. Dado um determinado problema geral de otimização global

$P$ , pode-se definir a condição:

$$R^* = \operatorname{argmin}_{R \geq 0} T(R). \quad (3.44)$$

No Capítulo 4, apresentamos os resultados obtidos que demonstram a importância da inclusão do resetting no processo de difusão numa cadeia linear e como ela influencia significativamente a dinâmica do sistema.

## 4 Resultados e Discussões

Neste capítulo, implementamos a técnica do espaço de Fock para obter os momentos do tempo de primeira passagem referentes a caminhadas aleatórias com reinicialização em cadeias lineares. Os resultados computacionais apresentados foram obtidos por simulações numéricas determinísticas, a partir da construção e manipulação direta das matrizes de transição associadas aos processos de difusão com reinicialização. Essas simulações não dependem de amostragem estocástica massiva, como em métodos de Monte Carlo, mas sim da resolução das equações que governam o sistema. O software utilizado foi o Mathematica devido a sua poderosa manipulação simbólica, notação matemática clara e simplicidade na manipulação de matrizes. Posteriormente, utilizando métodos analíticos, buscamos otimizar as caminhadas aleatórias, a fim de reduzirmos os momentos de primeira passagem.

### 4.1 Influência da reinicialização no MFPT

Nesta seção, realizamos uma exploração de parâmetros em um sistema de difusão clássica em cadeias lineares com o formalismo do espaço de Fock discutido no capítulo anterior. Os parâmetros explorados foram o número de partículas  $N$ , número de sítios  $n$ , sítio de reinicialização  $r$ , taxa de resetting  $R$  e taxas de difusão  $D_L$  e  $D_R$ . O hamiltoniano utilizado foi a equação (3.30).

Sabendo que não podemos ter mais de uma partícula ocupando o mesmo sítio, o número de configurações possíveis para  $N$  partículas em  $n$  sítios é dado pelo coeficiente binomial:

$$\binom{n}{N} = \frac{n!}{N!(n-N)!}. \quad (4.1)$$

Por exemplo, se temos uma cadeia com duas partículas em quatro sítios, teremos  $\frac{4!}{2!(4-2)!} = 6$  configurações possíveis, o que nos dá um Quasi-Hamiltoniano cuja representação matricial é  $6 \times 6$ . Assim, desde já, podemos constatar que o tamanho da matriz aumentará conforme aumentamos o número de configurações do sistema.

#### 4.1.1 Caminhadas aleatórias simétricas

Iniciamos nossa análise considerando uma caminhada aleatória simétrica  $D_R = D_L = 1$  descrita pelo quasi-Hamiltoniano (3.30). Variamos o parâmetro de resetting  $R$  para cada número de sítios  $n$ , mantendo fixos  $\gamma = 1$ ,  $N = 2$ ,  $r = 2$  e  $|\Psi(0)\rangle = |110\dots\rangle$  (com as partículas iniciando na extremidade esquerda da cadeia).

#### 4.1.1.1 MFPT em função do parâmetro de resetting variando o tamanho da cadeia

A média do tempo de primeira passagem  $\langle T \rangle$  para cadeias de  $n = 4$  a  $n = 10$  sítios é apresentada na Tabela 1 para  $R = 0$ ,  $R = 0.1$ ,  $R = 0.25$  e  $R = 1$ . Na figura 7 apresentamos o comportamento de  $\langle T \rangle$  para os valores de  $R$  acima citados variando o número de sítios  $n$  da cadeia. É possível notar uma considerável diferença entre o comportamento dos dados com  $R > 0$  (curvas em vermelho) e o comportamento para  $R = 0$  (curvas em azul). Notemos também que a influência do resetting se torna mais relevante conforme aumentamos o tamanho da cadeia, o que é constatado ao observarmos um aumento significativo do MFPT. Portanto, a modificação da taxa de resetting  $R$  altera drasticamente o comportamento do MFPT.

**Tabela 1** – Comportamento do MFPT para vários valores do parâmetro de resetting  $R$  em função do número de sítios  $n$ .

$n$	$R = 0$	$R = 0.1$	$R = 0.25$	$R = 1$
4	2.66	2.72	2.77	3
5	4.93	5.15	5.44	6.57
6	7.77	8.47	10.92	13.35
7	11.23	12.88	15.23	26.13
8	15.27	18.77	24.32	49.99
9	19.89	26.53	37.64	97.23
10	25.11	36.69	56.64	184.92

Fonte: Elaborado pelo autor.

A distribuição de tempo de primeira passagem  $f(t)$  também é afetada por conta da inclusão do resetting, como podemos ver na Figura 8, onde o pico para  $R = 0.25$  é menor do que para  $R = 0$ , pois as partículas podem retornar ao sítio  $r = 2$ , que está no início da cadeia, atrasando a sua chegada ao sítio absorvedor  $r = 10$ . Observa-se também o efeito do resetting na cauda da distribuição, que é mais longa se comparada com a da situação sem resetting. Desta forma, podemos constatar que a inserção do sítio de resetting no início da cadeia acaba por atrasar a chegada das partículas ao sítio absorvedor, que por sua vez está localizado na extremidade direita da cadeia. Vamos agora analisar o que ocorre com as médias de ocupação e variâncias dos sítios.

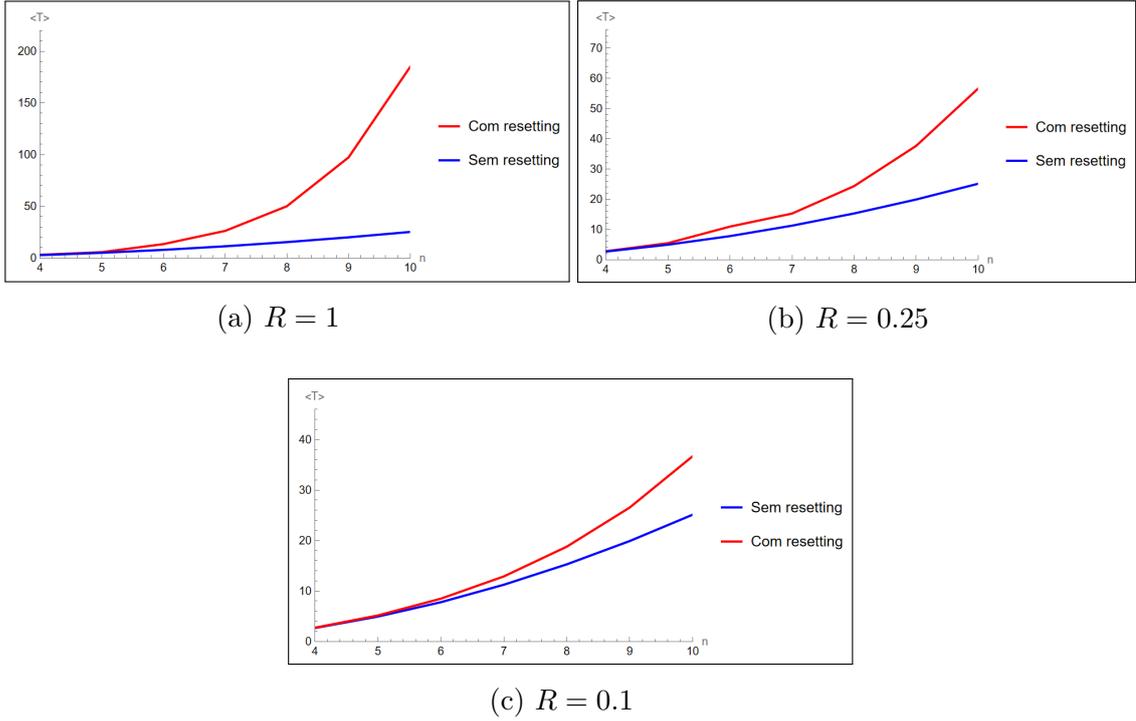


Figura 7 – Gráfico de  $\langle T \rangle$  vs  $n$ . As curvas vermelhas representam o comportamento do MFPT com resetting, enquanto que as curvas azuis refletem o comportamento sem resetting. Podemos observar que a diferença de MFPT entre as curvas vermelha e azul diminui conforme a taxa  $R$  é também diminuída.

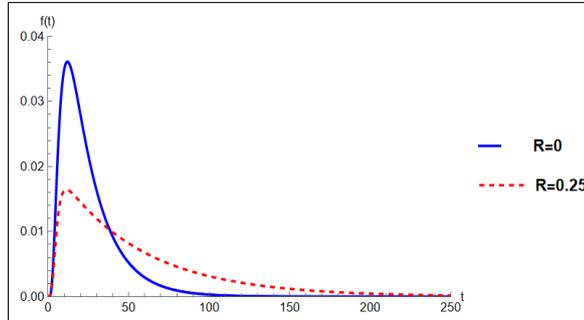


Figura 8 – Distribuição de probabilidade do tempo de primeira passagem para duas partículas em dez sítios com  $|\Psi(0)\rangle = |1100000000\rangle$ .

#### 4.1.1.2 Médias e Variâncias

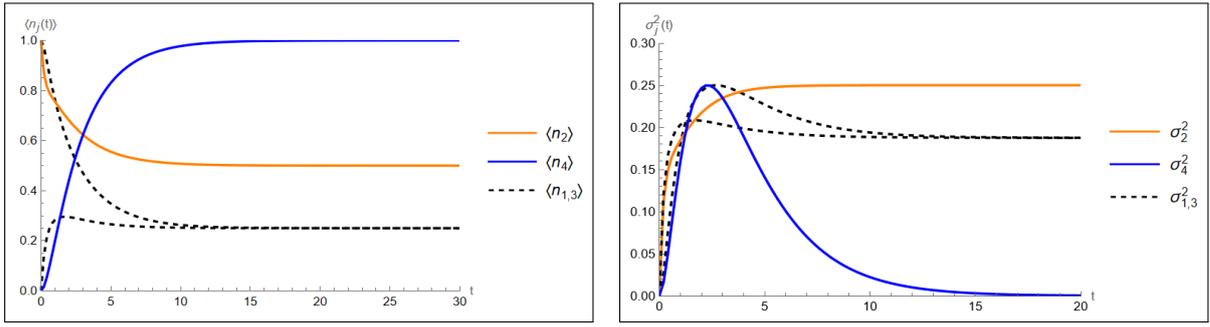
A média do número de ocupação do  $j$ -ésimo sítio é calculada a partir da soma das probabilidades associadas às configurações onde esse sítio está ocupado

$$\langle n_j(t) \rangle = \sum_{\eta} b_j^{\eta} P_{\eta}(t), \quad (4.2)$$

onde  $b_j^{\eta} = 1$  se o  $j$ -ésimo sítio está ocupado e 0 se ele estiver vazio. Já a variância dos sítios é

$$\sigma_j^2(t) = \langle n_j(t) \rangle [1 - \langle n_j(t) \rangle], \quad (4.3)$$

já que  $\langle n_j^2(t) \rangle = \langle n_j(t) \rangle$  uma vez que  $b_j^{\eta}$  só pode ser 0 ou 1.



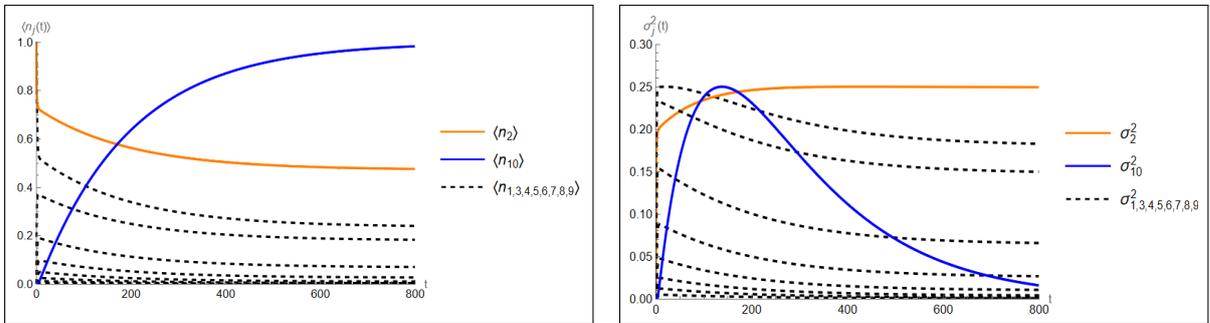
((a)) Médias de ocupação dos sítios para uma cadeia com quatro sítios

((b)) Variâncias da posição das partículas para uma cadeia quatro sítios

Figura 9 – Médias e variâncias para duas partículas em quatro sítios com  $R = 1$  e  $|\Psi(0)\rangle = |1100\rangle$ .

Na Figura 9, é possível notar que a média do número de ocupação  $\langle n_2 \rangle$  é maior quando comparado com a média dos sítios  $\langle n_1 \rangle$  e  $\langle n_3 \rangle$  devido aos efeitos de reinicialização. Os valores assintóticos dessas médias são  $\langle n_{1,3} \rangle (t \rightarrow \infty) = 1/4$ ,  $\langle n_2 \rangle (t \rightarrow \infty) = 1/2$  e  $\langle n_4 \rangle (t \rightarrow \infty) = 1$ .

Notemos, observando o painel direito da Figura 9 que as variâncias do sítio de reinicialização são sempre maiores, evidenciando uma maior variabilidade do número de ocupação deste sítio, ou seja, as partículas costumam mover-se com mais frequência para dentro e fora deste sítio; isto deve-se ao efeito de reinicialização.



((a)) Médias dos 10 sítios

((b)) Variâncias dos 10 sítios

Figura 10 – Médias e variâncias para duas partículas em dez sítios, com  $R = 1$  e  $|\Psi(0)\rangle = |1100000000\rangle$ .

Observando o painel esquerdo da Figura 10, antes do ponto de interseção  $\tau_{10}$  que faz  $\langle n_2 \rangle = \langle n_{10} \rangle$ , as partículas ocupam em média mais o sítio  $r = 2$  devido ao efeito de reinicialização. Após esse ponto de interseção, temos  $\langle n_2 \rangle < \langle n_{10} \rangle$ , o comportamento é similar ao da Figura 9. Podemos interpretar este ponto de interseção como um ponto de “virada”, onde a média do número de ocupação do sítio absorvedor é maior que qualquer outro sítio da cadeia incluindo o de resetting.

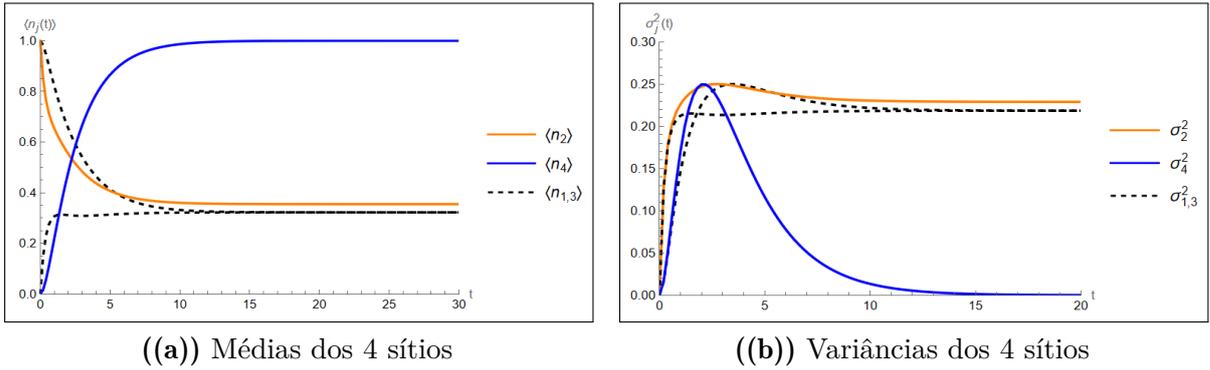


Figura 11 – Médias e variâncias para duas partículas em quatro sítios, com  $R = 0.1$  e  $|\Psi(0)\rangle = |1100\rangle$ .

Podemos notar, na Figura 11, que há um aumento de distância assintótica entre as médias  $\langle n_2 \rangle$  e  $\langle n_4 \rangle$  em relação ao caso  $R = 1$ , que deve-se à redução da média de ocupação do sítio 2 devido à redução da taxa de resetting. Há também uma aproximação assintótica entre as variâncias  $\sigma_2^2(t \rightarrow \infty)$  e  $\sigma_{1,3}^2(t \rightarrow \infty)$ , devido também à redução da taxa de resetting, tendo em vista que as flutuações em torno deste sítio agora serão menores.

## 4.1.2 Caminhadas aleatórias assimétricas e superlotação

Nesta parte do trabalho, consideramos uma caminhada aleatória assimétrica, com a variação dos parâmetros  $r$ ,  $R$  e  $|\Psi(0)\rangle$ , utilizando o quasi-Hamiltoniano 3.30. Iremos analisar o que ocorre com o sistema quando colocamos inicialmente duas partículas posicionadas no centro da cadeia. O par de partículas estará centralizado para cadeias pares e descentralizado em um passo à esquerda (em relação ao centro geométrico da cadeia) para ímpares. O sítio  $r$  estará posicionado no centro para número de sítios ímpares, e descentralizado para a esquerda em relação ao centro geométrico da cadeia para pares. Posteriormente, preencheremos com mais partículas o lado da cadeia onde o viés é menor e veremos o que ocorre a partir do efeito de superlotação (crowded) [Duarte-Filho, Santos e Gaffney 2020].

### 4.1.2.1 Estudo do MFPT com viés para a direita

Nesta parte, estudamos a cadeia linear com viés para a direita, onde  $D_L = \frac{1}{3}$  e  $D_R = \frac{2}{3}$ . Na Tabela 2 podemos observar os dados referentes à variação do parâmetro  $R$  para cada cadeia com sítio  $n$ . Os dados dessa tabela são apresentados na Figura 12. É possível notar, analisando a curva com resetting da Figura 12 que existe um comportamento quase linear até  $n = 9$ , após isso, começam a ocorrer saltos maiores até chegar em  $n = 12$ . O comportamento quase linear até  $n = 9$  reflete favorecimento à chegada ao sítio absorvedor por conta de haver um viés para a direita. Entretanto, para cadeias a partir de 10 sítios, o aumento do tamanho da cadeia torna-se mais relevante do que a assimetria para a direita.

**Tabela 2** – Comparação entre o MFPT de caminhadas assimétricas sem resetting ( $R = 0$ ) e com resetting ( $R = 1$ ) em função do número de sítios  $n$ . As taxas de difusão são  $D_L = \frac{1}{3}$  e  $D_R = \frac{2}{3}$ .

$n$	$R = 0$	$R = 1$
4	1.53	1.70
5	3.75	4.28
6	3.84	5.51
7	6.16	8.30
8	6.20	11.63
9	8.64	14.60
10	8.66	21.48
11	11.16	24.64
12	11.17	39.38

**Fonte:** Elaborado pelo autor.

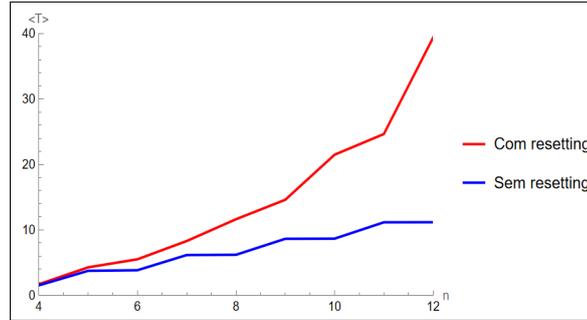


Figura 12 – Gráfico do MFPT em função do número de sítios  $\langle T \rangle$  vs  $n$  com viés para a direita. A curva azul é referente a curva sem resetting, enquanto que a curva com resetting (vermelha) possui uma taxa  $R = 1$ . Os dados de MFPT foram obtidos até  $n = 12$  sítios.

Na Figura 12, o formato de “escada” para a curva azul deve-se à existência de uma dinâmica de centralização e descentralização (ao variarmos  $n$ ) da condição inicial do par de partículas (centralizadas para cadeias pares e descentralizadas à esquerda para ímpares). Esse formato não é visto para o caso com reinicialização, porque o sítio  $r$  (centralizado para cadeias ímpares e descentralizado à esquerda para pares) fica sempre localizado em um dos sítios onde as partículas são inicializadas para qualquer  $n$ . Essa configuração acaba por reduzir o efeito das oscilações das condições iniciais ao variarmos  $n$ , resultando em um MFPT mais suavizado.

Atribuindo  $n_{\text{par}}$  como sendo o número de sítios pares, observamos que na Tabela 2, para  $R = 0$ , podemos induzir a expressão

$$\langle T(n_{\text{par}} + 1) \rangle - \langle T(n_{\text{par}}) \rangle > \langle T(n_{\text{par}}) \rangle - \langle T(n_{\text{par}} - 1) \rangle. \quad (4.4)$$

Evidenciando que, a diferença de MFPT ao transitar de uma cadeia com sítios pares para ímpares é maior (lado esquerdo da Eq. (4.4) do que transitar de ímpares para pares

(lado direito da Eq. (4.4). Devemos isso ao fato de que ao transitarmos de pares para ímpares, descentralizamos a condição inicial em um passo a esquerda do centro geométrico da cadeia, e atrasamos a chegada das partículas ao sítio absorvedor devido à exclusão de volume.

Observando a coluna com  $R = 1$  da Tabela 2, podemos também induzir a expressão

$$\langle T(n_{\text{par}} + 1) \rangle - \langle T(n_{\text{par}}) \rangle < \langle T(n_{\text{par}}) \rangle - \langle T(n_{\text{par}} - 1) \rangle, \quad (4.5)$$

que é similar a expressão (4.4), mas como o sinal de desigualdade invertido. A diferença de MFPT no lado esquerdo da Eq. (4.5) é menor do que a diferença no lado direito. Devemos isso ao fato de que ao transitar de uma cadeia com números de sítios pares para ímpares, o sítio  $r$  passa a ser centralizado, ocasionando um favorecimento à chegada das partículas ao sítio absorvedor em relação ao caso onde  $r$  é descentralizado para a esquerda (estando mais distante do sítio absorvedor).

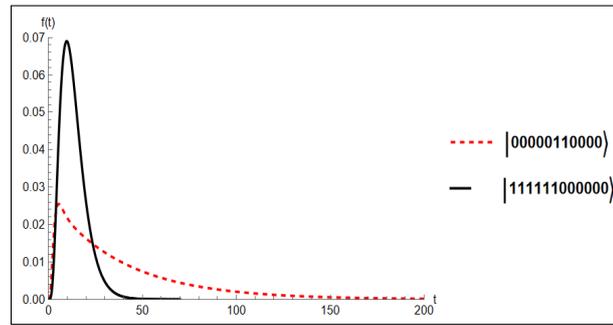


Figura 13 – Distribuição de probabilidade FPT para  $|\Psi(0)\rangle = |000001100000\rangle$  e  $|\Psi(0)\rangle = |111111000000\rangle$ , com  $R = 1$ ,  $D_L = \frac{1}{3}$  e  $D_R = \frac{2}{3}$

Na Figura 13, podemos notar que há uma diferença em ambas as distribuições de FPT. Para o caso com  $|\Psi(0)\rangle = |111111000000\rangle$ , o pico é maior (no eixo  $f(t)$ ) em relação ao caso com  $|\Psi(0)\rangle = |000001100000\rangle$ , indicando uma maior concentração de probabilidade do tempo de primeira passagem FPT, devido a restrição do movimento para a esquerda causado pela exclusão de volume.

#### 4.1.2.2 Estudo do MFPT com viés para a esquerda

Neste segmento, estudamos a cadeia com viés para a esquerda, tal qual  $D_L = \frac{2}{3}$  e  $D_R = \frac{1}{3}$ . Podemos examinar, na Tabela 3, os dados relacionados à variação do parâmetro  $R$  para cada cadeia com  $n$  sítios. Os dados da Tabela 3 são apresentados na Figura 14.

Observando a Figura 14, é possível notar que, de  $n = 4$  até  $n = 6$ , ambas as curvas praticamente se sobrepõem. A partir de  $n = 7$ , a diferença entre ambos os gráficos se acentua, mostrando que a reinicialização reduz significativamente o MFPT para cadeias maiores. Devemos este resultado ao fato de que há um viés para esquerda e o sítio  $r$  assume

**Tabela 3** – Comparação entre o MFPT de caminhadas assimétricas sem resetting ( $R = 0$ ) e com resetting ( $R = 1$ ) em função do número de sítios  $n$ . As taxas de difusão são  $D_L = \frac{2}{3}$  e  $D_R = \frac{1}{3}$ .

$n$	$R = 0$	$R = 1$
4	5.74	6.86
5	20.79	14.00
6	38.89	40.00
7	100.03	47.67
8	195.67	153.46
9	446.22	164.27
10	870.46	569.93
11	1958.92	582.29

**Fonte:** Elaborado pelo autor.

uma posição estratégica para a redução do MFPT na cadeia, (já que está centralizado para cadeias com sítios ímpares e descentralizado para pares).

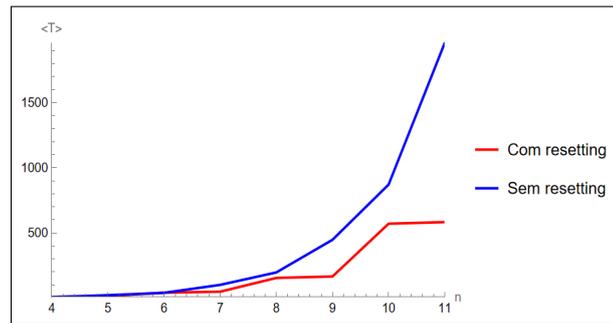


Figura 14 – Gráfico do MFPT em função do número de sítios  $\langle T \rangle$  vs  $n$  com viés para a esquerda. A curva azul é referente a curva sem resetting, enquanto que a curva com resetting (vermelha) possui uma taxa  $R = 1$ . Os dados de MFPT foram obtidos até  $n = 11$  sítios.

## 4.2 Métodos analíticos para a obtenção de uma taxa $R^*$ otimizada

Na Seção 4.1, estudamos situações onde atribuímos taxas de reinicialização  $R$  que foram escolhidas previamente, para analisar os efeitos do resetting na difusão em cadeias lineares. Nesta seção atual, nos dedicamos a construir métodos para obtenção de uma taxa  $R^*$  que venha a otimizar o MFPT. Com o MFPT otimizado, a partir da taxa  $R^*$ , iremos compará-lo com momentos de primeira passagem arbitrários para testar a sua real eficiência.

### 4.2.1 Os momentos de saída em termos de $H_\gamma'^R$

Nesta parte, analisaremos como a escolha da taxa de resetting pode ser utilizada para otimizar o tempo médio de primeira passagem, com base nas ideias apresentadas na Seção 3. No contexto de busca discutido na Seção 3, observamos que é possível determinar um valor ótimo  $R^*$ , que minimiza o tempo médio necessário para encontrar um alvo específico em uma posição determinada de uma cadeia linear. Seguindo este raciocínio, pretendemos encontrar um método que nos permita encontrar uma taxa  $R^*$  otimizada para a dinâmica de difusão com cadeias em espaço de estados discretos. Inicialmente, apresentamos alguns conceitos iniciais que são importantes para entender como obtivemos uma expressão analítica com um MFPT otimizado.

A probabilidade de de nenhuma partícula ter atingido o sítio mais à direita até um instante de tempo  $t$  é dada por:

$$P(\eta \notin \eta_{\text{abs.}}, t) = \sum_{\eta \neq \eta_{\text{abs.}}} \langle \eta | e^{-H_\gamma'^R t} | \Psi(0) \rangle, \quad (4.6)$$

onde  $\eta_{\text{abs.}}$  representa uma configuração onde uma partícula foi absorvida, em outras palavras, uma configuração onde o sítio mais à direita está ocupado. Essa equação é mais conhecida como equação de sobrevivência, onde aqui apresentamos em termos do nosso quasi-Hamiltoniano de reinicialização (3.30). Seja  $T$  uma variável aleatória que representa o tempo de primeira passagem, a probabilidade de uma partícula atingir o sítio mais à direita em um tempo  $T \leq t$  é dada por [Duarte-Filho, Santos e Gaffney 2020]:

$$P(T \leq t) = F(t) = 1 - \sum_{\eta \neq \eta_{\text{abs.}}} \langle \eta | e^{-H_\gamma'^R t} | \Psi(0) \rangle, \quad (4.7)$$

onde  $\eta$  é uma configuração genérica do sistema, já  $\eta_{\text{abs.}}$  é o subconjunto dessas configurações com uma partícula ocupando o sítio mais à direita. A distribuição FPT é dada por [Bressloff e Newby 2013]:

$$f(t) = \frac{\partial F(t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial t} \sum_{\eta \neq \eta_{\text{abs.}}} \langle \eta | e^{-H_\gamma'^R t} | \Psi(0) \rangle. \quad (4.8)$$

A matriz  $e^{-H_\gamma'^R t}$  representa as transições entre as configurações do sistema. Representado na base canônica, o vetor  $|\Psi(0)\rangle$  representa a configuração inicial do sistema, é um vetor coluna que possui um elemento igual a um e os restantes iguais a zero. Dessa forma, a operação  $e^{-H_\gamma'^R t} |\Psi(0)\rangle$  seleciona a coluna da matriz  $e^{-H_\gamma'^R t}$  referente a configuração inicial  $|\Psi(0)\rangle$ . O  $\langle \eta |$  é representado por um vetor linha na base canônica. A média do tempo de primeira passagem é obtida da distribuição de primeira passagem, equação (1.2).

### 4.2.2 Obtendo $R^*$

Para determinar a taxa  $R^*$  que otimiza a média do tempo de primeira passagem, equação (1.2), utilizamos conceitos de álgebra linear. Vamos definir uma matriz  $H^*$  que será

um subespaço da nossa matriz  $H'_\gamma$ , ou seja,  $H^* \subseteq H'_\gamma$ , de forma que  $H^*$  esteja restrito ao subespaço de sobrevivência  $\eta\eta_{abs.}$ . O hamiltoniano  $H'_\gamma$  codifica todas as transições possíveis entre as configurações do sistema, incluindo aquelas em que o sítio mais à direita — que é o absorvedor — está ocupado. Um exemplo desse tipo de transição seria  $|0011\rangle \rightarrow |0101\rangle$ . Por outro lado, a matriz  $H^*$  é construída para desconsiderar transições que envolvem configurações com uma partícula no sítio absorvedor.

A matriz  $H^*$  é obtida de  $H'_\gamma$ , simplesmente retirando as colunas e as linhas referentes a transições para configurações que possuem uma partícula no sítio mais à direita  $\eta_{abs.}$ . Seja  $\dim(H'_\gamma)$  a dimensão de  $H'_\gamma$  e  $N_{\eta_{abs.}}$  o número de configurações  $\eta_{abs.}$ , temos

$$\dim(H^*) = \dim(H'_\gamma) - N_{\eta_{abs.}} \quad (4.9)$$

Agora que já conhecemos as características de  $H^*$ , vamos definir uma função de sobrevivência em termos da matriz  $H^*$ . A função de sobrevivência será:

$$P^*(t) = V e^{-H^*t} |\Psi^*(0)\rangle, \quad (4.10)$$

onde definimos o vetor unidade  $V = \mathbf{1}_{\dim(H^*)} = (1, 1, 1, \dots, 1)$ , que agirá como um somatório dos elementos do vetor coluna  $e^{-H^*t} |\Psi^*(0)\rangle$ . Desta forma, a equação (4.10) é equivalente à equação (4.6), porém em termos de uma matriz de dimensionalidade reduzida. Substituindo a equação (4.10) em (4.8), temos

$$f(t) = -\frac{\partial}{\partial t} [V e^{-H^*t} |\Psi^*(0)\rangle]. \quad (4.11)$$

Substituindo a equação (4.11) em (1.2), temos

$$\langle T \rangle = -\int_0^\infty t \frac{\partial}{\partial t} [V e^{-H^*t} |\Psi^*(0)\rangle] dt. \quad (4.12)$$

Para o cálculo que vem a seguir, mantemos todos os parâmetros da equação de sobrevivência (4.10) fixos, de forma que somente a dependência temporal importa:

$$\langle T \rangle = -\int_0^\infty t \frac{dP^*}{dt} dt. \quad (4.13)$$

Podemos resolver esta integral por partes. Seja  $u = t$  e  $dv = \frac{dP^*}{dt} dt$  temos:

$$\begin{aligned} \langle T \rangle &= -tP^*(t) \Big|_0^\infty + \int_0^\infty P^*(t) dt \\ &= \int_0^\infty P^*(t) dt \\ &= \int_0^\infty V e^{-H^*t} |\Psi^*(0)\rangle \end{aligned} \quad (4.14)$$

já que  $P^*(t) \propto e^{-\lambda t} \rightarrow 0$  para  $t \rightarrow \infty$ , onde  $\lambda$  é o menor autovalor não nulo de  $H^*$ . Sabendo que  $V$  e  $|\Psi^*(0)\rangle$  não dependem de  $t$ , podemos escrever (4.14) da forma:

$$\langle T \rangle = V \left[ \int_0^\infty dt e^{-H^*t} \right] |\Psi^*(0)\rangle. \quad (4.15)$$

Podemos resolver a integral através das relações de derivadas. Como a matriz  $H^*$  não depende de  $t$ , podemos operar da forma:

$$\frac{d}{dt}e^{-H^*t} = -H^*e^{-H^*t}. \quad (4.16)$$

Integrando ambos os lados da equação (4.16), temos

$$-H^* \int_0^\infty e^{-H^*t} dt = \int_0^\infty \frac{d}{dt}e^{-H^*t} dt, \quad (4.17)$$

assim:

$$-H^* \int_0^\infty e^{-H^*t} dt = e^{-H^*t} \Big|_0^\infty = 0 - I, \quad (4.18)$$

o que nos leva a:

$$H^* \int_0^\infty e^{-H^*t} dt = I. \quad (4.19)$$

Multiplicando ambos os lados da equação (4.18) por  $H^{*-1}$ , temos

$$\int_0^\infty e^{-H^*t} dt = H^{*-1}. \quad (4.20)$$

Substituindo a equação (4.20) em (4.15), temos finalmente

$$\langle T(R) \rangle = V H^{*-1} |\Psi^*(0)\rangle. \quad (4.21)$$

A equação (4.21) nos fornece uma maneira sistemática de obter a média do tempo de primeira passagem em função de  $R$ , já que a matriz  $H^{*-1}$  está em função de  $R$ . Sendo assim, basta aplicarmos a condição

$$\frac{d}{dR} \langle T(R) \rangle = \frac{d}{dR} [V H^{*-1} |\Psi^*(0)\rangle] = 0, \quad (4.22)$$

para determinar  $R^*$  que minimiza a média do tempo de primeira passagem. A existência de um mínimo depende das características do sistema que estão contidas em  $H_\gamma^R$ . A condição para a existência de um mínimo em  $T(R)$  é influenciada pela localização do sítio de reinicialização. Para que essa condição seja atendida, é ideal que esse sítio esteja mais próximo do absorvedor, acelerando o processo de primeira passagem. Caso contrário, se o sítio de reinicialização estiver muito distante do absorvedor, a função  $T(R)$  será monotonicamente crescente em relação a  $R$ . Podemos perceber que na equação (4.21) os termos  $V$  e  $|\Psi^*(0)\rangle$  são adimensionais, ou seja, não possuem dimensão física, nos levando a concluir que o significado físico temporal está ligado à matriz  $H^{*-1}$ , que por sua vez, possuirá elementos  $H_{ij}^{*-1}$ . Sabendo que a soma dos elementos de uma coluna de  $H^{*-1}$  nos dá o MFPT, então cada elemento dessa coluna será uma parcela de tempo que gasta em cada estado  $i$ , considerando que a dinâmica parte de um estado  $j$ .

Na Figura 15 temos um exemplo de como o MFPT otimizado sempre será menor, independente da escolha  $R \neq R^*$  que fizermos. A dinâmica de escolha do sítio  $r$  foi tomada de tal forma que exista uma condição de mínimo para o MFPT, ou seja,  $r$  precisa favorecer

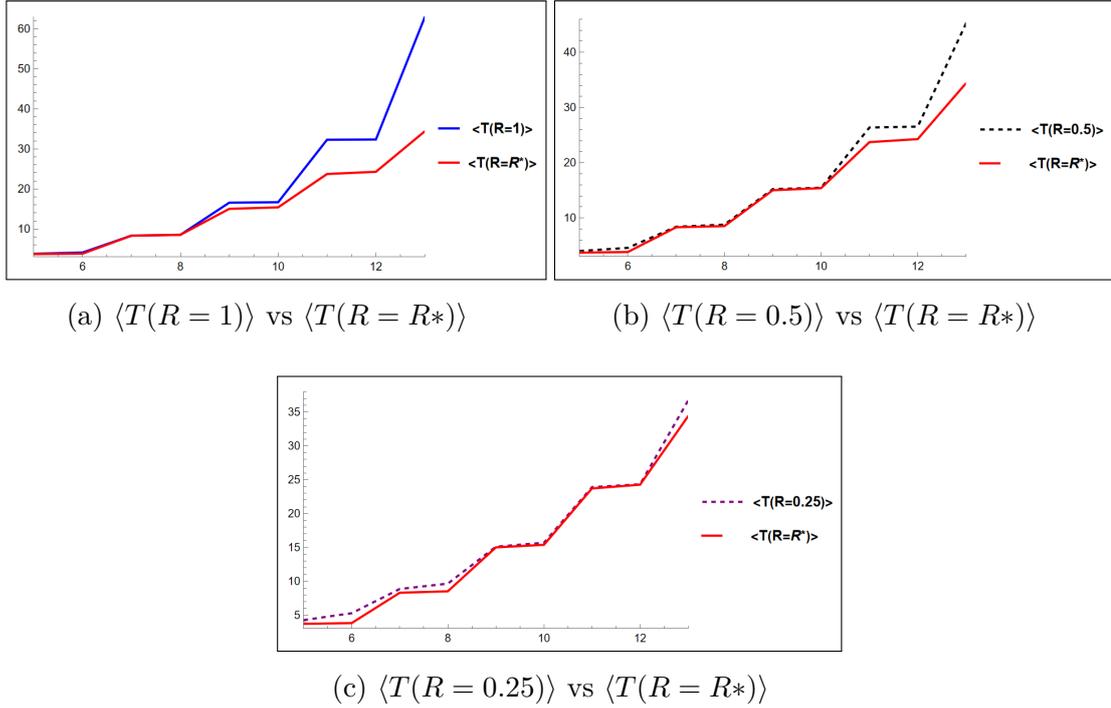


Figura 15 – As três figuras mostram a dinâmica do MFPT para duas partículas em cinco a quatorze sítios com difusão simétrica  $D_R = D_L = 1$ , onde o sítio  $r$  está localizado no centro geométrico da cadeia para sítios ímpares e descentralizado em um passo do centro geométrico para a direita em sítios pares. A posição inicial das partículas é  $|\Psi(0)\rangle = |110\dots\rangle$ .

a chegada das partículas ao sítio absorvedor, pois, se  $r$  desfavorecer a chegada, o MFPT será sempre crescente e o mínimo será sempre em  $R^* = 0$ . Porém, dentro do contexto deste favorecimento, para que haja um bom aproveitamento da reinicialização,  $r$  deve estar posicionado relativamente próximo do sítio absorvedor, mas longe o suficiente para que o MFPT não esteja próximo a se igualar ao tempo médio para o primeiro reset. Isso iria ocorrer caso colocássemos  $r$  exatamente no sítio absorvedor, fazendo com que não haja um mínimo e o processo de busca não faça sentido em existir, pois a partícula já estaria localizada no fim da cadeia. Assim, é necessário que haja uma estratégia na escolha de  $r$ . Podemos observar também que, na Figura 15, a taxa de reinicialização  $R^* \approx 0.25$  para qualquer número de sítios, evidenciando a consistência de tal valor ótimo mesmo quando o tamanho da cadeia se modifica significativamente.

De maneira geral, é possível obter todos os momentos de  $T(R)$  através de  $H^{*-1}$ , onde

$$\langle T^l \rangle = - \int_0^\infty t^l \frac{dP^*}{dt} dt. \quad (4.23)$$

Escolhendo  $u = t^l$  e  $dv = \frac{dP^*}{dt} dt$ , temos:

$$\langle T^l \rangle = -t^l P^*(t) \Big|_0^\infty + \int_0^\infty P^*(t) [lt^{l-1}] dt, \quad (4.24)$$

assim,

$$\begin{aligned} \langle T^l \rangle &= l \int_0^\infty P^*(t) t^{l-1} dt \\ &= lV \left[ \int_0^\infty t^{l-1} e^{-H^*t} dt \right] |\Psi^*(0)\rangle. \end{aligned} \quad (4.25)$$

A integral entre colchetes na equação (4.25) é a definição da função gamma de Euler, onde:

$$\int_0^\infty t^{l-1} e^{-H^*t} dt = \frac{\Gamma(l)}{H^{*l}} = \frac{(l-1)!}{H^{*l}}. \quad (4.26)$$

Substituindo a Eq. (4.26) em (4.25), temos

$$\langle T^l \rangle = lV \frac{(l-1)!}{H^{*l}} |\Psi^*(0)\rangle. \quad (4.27)$$

Sabendo que  $H^*$  é diagonalizável (iremos demonstrar mais adiante), podemos decompô-la em:

$$H^{*l} = (KDK^{-1})^l. \quad (4.28)$$

Onde  $K$  é a matriz de autovetores de  $H^*$ ,  $D$  a matriz diagonal dos autovalores e  $K^{-1}$  a matriz inversa de  $K$ . Se tivermos, por exemplo,  $l = 2$ , teremos que:

$$H^{*2} = (KDK^{-1})^2 = (KDK^{-1})(KDK^{-1}). \quad (4.29)$$

Portanto,

$$H^{*2} = KD(K^{-1}K)DK^{-1} = KDIDK^{-1} = KD^2K^{-1}. \quad (4.30)$$

Assim, com este raciocínio, podemos generalizar para qualquer  $l$  e escrever:

$$H^{*l} = KD^lK^{-1}. \quad (4.31)$$

Vamos tentar encontrar uma matriz  $Y$ , tal que, para  $l = 1$  temos  $H^*Y = YH^* = I$ . Propondo que  $Y = KD^{-1}K^{-1}$ , teremos à esquerda:

$$(KDK^{-1})(KD^{-1}K^{-1}) = KD(K^{-1}K)D^{-1}K^{-1} = KDID^{-1}K^{-1} = I, \quad (4.32)$$

e à direita

$$(KD^{-1}K^{-1})(KDK^{-1}) = KD^{-1}(K^{-1}K)DK^{-1} = KD^{-1}IDK^{-1} = I. \quad (4.33)$$

Desta forma,  $H^*Y = YH^* = I$ , nos levando a concluir que  $Y = H^{*-1} = (KDK^{-1})^{-1}$ , portanto,  $KD^{-1}K^{-1} = (KDK^{-1})^{-1}$ , que por sua vez, ao lado esquerdo, temos  $H^{*l=-1}$  e ao lado direito, temos  $(H^{*l=1})^{-1}$ , ou seja,  $H^{*l=-1} = (H^{*l=1})^{-1}$ . Generalizando para qualquer  $l$ , temos:

$$H^{*-l} = (H^{*l})^{-1} = \frac{1}{H^{*l}}. \quad (4.34)$$

Substituindo a equação (4.34) em (4.27), teremos a equação final para  $\langle T^l \rangle$ :

$$\langle T^l \rangle = l!V H^{*-l} |\Psi^*(0)\rangle. \quad (4.35)$$

### 4.2.3 Forma alternativa de obtenção de $R^*$

#### 4.2.3.1 Distribuição FPT a partir da equação mestra

Ainda é possível obtermos o MFPT otimizado a partir dos autovalores e autovetores do Quasi-Hamiltoniano  $H^*$ . Para iniciar a demonstração, tomemos a equação mestra (3.14) e vamos substituí-la na equação:

$$f(t) = - \sum_{\eta \neq \eta_{\text{abs.}}} \frac{\partial P_{\eta}}{\partial t}. \quad (4.36)$$

Que nos dá:

$$f(t) = \sum_{\eta \neq \eta_{\text{abs.}}} \sum_{\eta'} [T_{\eta \rightarrow \eta'} P(\eta, t) - T_{\eta' \rightarrow \eta} P(\eta', t)]. \quad (4.37)$$

A equação (4.37) pode ser escrita em um formato mais compacto. Para que fique mais claro, antes vamos mostrar um exemplo do uso da equação (4.37) em um sistema com duas partículas em quatro sítios, com o mais à direita sendo o absorvedor. Para um sistema físico deste tipo, as possibilidades de estado serão:  $|1\rangle = |1100\rangle$ ,  $|2\rangle = |1010\rangle$ ,  $|3\rangle = |1001\rangle$ ,  $|4\rangle = |0110\rangle$ ,  $|5\rangle = |0101\rangle$  e  $|6\rangle = |0011\rangle$ . Agora, iremos separar a equação (4.37) em duas somas, de forma que:

$$f(t) = \sum_{\eta \neq \eta_{\text{abs.}}} \sum_{\eta' \neq \eta_{\text{abs.}}} [T_{\eta \rightarrow \eta'} P(\eta, t) - T_{\eta' \rightarrow \eta} P(\eta', t)] + \sum_{\eta \neq \eta_{\text{abs.}}} \sum_{\eta' = \eta_{\text{abs.}}} [T_{\eta \rightarrow \eta'} P(\eta, t) - T_{\eta' \rightarrow \eta} P(\eta', t)]. \quad (4.38)$$

Seja primeiro termo do lado direito da equação (4.38)  $S_1$ , temos:

$$\begin{aligned} S_1 &= [T_{1 \rightarrow 2} P_1(t) - T_{2 \rightarrow 1} P_2(t)] \\ &+ [T_{2 \rightarrow 1} P_2(t) + T_{2 \rightarrow 4} P_2(t) - T_{1 \rightarrow 2} P_1(t) - T_{4 \rightarrow 2} P_4(t)] \\ &+ [T_{4 \rightarrow 2} P_4(t) - T_{2 \rightarrow 4} P_2(t)] \\ &= 0. \end{aligned} \quad (4.39)$$

Assim, o termo  $S_1$  se anula, ou seja, ele representa as contribuições entre estados que não são absorvedores para a distribuição de primeira passagem e por isso devem ser nulos, enquanto que para  $S_2$  temos:

$$\begin{aligned} S_2 &= [T_{2 \rightarrow 3} P_2(t) - 0] + [T_{4 \rightarrow 5} P_4(t) - 0] \\ &= T_{2 \rightarrow 3} P_2(t) + T_{4 \rightarrow 5} P_4(t). \end{aligned} \quad (4.40)$$

Em  $S_2$ , os termos iguais a 0 referem-se à taxa de saída dos estados absorvedores para os estados de sobrevivência, que por sua vez devem ser iguais a zero, pois se os estados são de saída, então não podem ser reversíveis. O que nos leva a concluir que:

$$\begin{aligned} f(t) &= \sum_{\eta \neq \eta_{\text{exit}}} \sum_{\eta' = \eta_{\text{exit}}} [T_{\eta \rightarrow \eta'} P(\eta, t) - T_{\eta' \rightarrow \eta} P(\eta', t)] \\ &= \sum_{\eta \neq \eta_{\text{exit}}} \sum_{\eta' = \eta_{\text{exit}}} T_{\eta \rightarrow \eta'} P(\eta, t). \end{aligned} \quad (4.41)$$

### 4.2.3.2 A diagonalizabilidade de $H^*$

Podemos interpretar a atuação dos estados absorvedores, dentro de um sistema associado a uma matriz geral  $H_\gamma$ , como espécies de “poços”, onde as probabilidades de ocorrência dos estados sobreviventes serão “sugadas” por tais estados absorvedores, como mostrado na Figura 16.

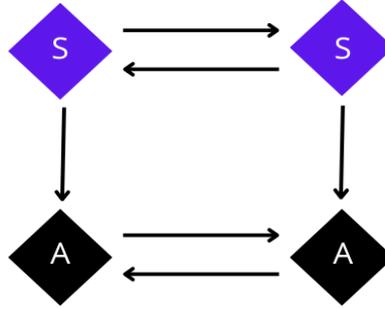


Figura 16 – Esquema de um processo de transição entre estados sobreviventes e absorvedores de um sistema físico representado por  $H_\gamma$ . As setas verticais representam as transições diretas dos estados de sobrevivência para os absorvedores e as horizontais representam transições entre estados referentes ao mesmo subespaço.

É possível notar, pelo esquema da Figura 16, que a probabilidade de encontrar o sistema em um estado sobrevivente em um dado instante de tempo diminui e, pela conservação da probabilidade, aumenta-se a chance de se encontrar o sistema em um estado absorvedor. Podemos esclarecer esse raciocínio através de uma relação com a equação mestra, ou seja, dado um  $P_\eta(t)$  pertencente ao subespaço de sobrevivência, poderíamos escrever a equação mestra como:

$$\frac{\partial \sum_\eta P_\eta(t)}{\partial t} = A - B, \quad (4.42)$$

onde  $A = \sum_\eta \sum_{\eta'} T_{\eta' \rightarrow \eta} P(\eta', t)$  representa o termo relacionado às transições dos estados absorvedores para os estados sobreviventes e  $B = \sum_\eta \sum_{\eta'} T_{\eta \rightarrow \eta'} P(\eta, t)$  está relacionado à transição dos estados de sobreviventes para os estados absorvedores. Como não há entrada de absorvedores no subespaço de sobrevivência, o termo  $A = 0$ , logo:

$$\frac{\partial \sum_\eta P_\eta(t)}{\partial t} = B < 0. \quad (4.43)$$

O que nos leva a concluir que expansões de  $P(t)$  do tipo de Jordan, onde:

$$P(t) = \sum_n e^{-\lambda_n t} \sum_j t^j v_j, \quad (4.44)$$

onde  $v_j$  é um vetor da base generalizada, são desnecessárias, tendo em vista que tal expansão contém a influência de termos transitórios como  $\tau = t^j e^{-\lambda_n t}$ , onde

$$\frac{d\tau}{dt} = jt^{j-1}e^{-\lambda_n t} - t^j \lambda_n e^{-\lambda_n t} = (j - \lambda_n t)t^{j-1}e^{-\lambda_n t}, \quad (4.45)$$

assim, para a condição  $\frac{d\tau}{dt} = 0$  temos que  $j - \lambda_n t = 0$ , o que nos dá

$$t_0 = \frac{j}{\lambda_n}. \quad (4.46)$$

A equação (4.46) é candidata a ser máximo ou mínimo de  $\tau$ . Entretanto, se  $t < t_0$ , temos  $j - \lambda_n t > 0$ , logo  $\frac{d\tau}{dt} > 0$  e  $\tau$  está crescendo. Se  $t > t_0$ , temos  $j - \lambda_n t < 0$ , logo  $\frac{d\tau}{dt} < 0$  e  $\tau$  está decrescendo. Como  $\frac{d\tau}{dt}$  muda de sinal positivo para negativo em torno de  $t_0$ , então esse ponto é de máximo. Assim, a Eq. (4.44) não é totalmente monótona e decrescente.

Portanto, podemos simplesmente expandir  $P(t)$  na base comum de autovetores do tipo:

$$P_\eta(t) = \sum_{n=1}^m c_n(0) v_n^j e^{-\lambda_n(R)t}, \quad (4.47)$$

onde  $v_n^j = \sum_w v_n^w$ , com  $w$  sendo uma componente do autovetor  $v_n$ , associada ao conjunto de estados  $j$ . A demonstração da equação (4.47) será mostrada adiante.

### 4.2.3.3 A distribuição FPT $f(t, R)$

Nesta etapa, vamos iniciar uma procura por uma função  $f(t, R)$ . Para iniciar, tomemos a equação mestra em termos da matriz  $H^*$  do nosso problema de duas partículas em quatro sítios, discutido na Seção 4.1:

$$\frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = -H^* |\Psi(t)\rangle. \quad (4.48)$$

A equação (4.48) para o problema de difusão simétrica com  $D = 1$ , de duas partículas em quatro sítios, discutida na Seção 4.1, pode ser escrita como

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} P_1(t) \\ P_2(t) \\ P_4(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -R & 2R & 0 \\ R & -5R & R \\ 0 & 2R & -2R \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_1(t) \\ P_2(t) \\ P_4(t) \end{bmatrix} \quad (4.49)$$

Selecionando o estado  $|1\rangle$ , teremos:

$$\frac{\partial P_1(t)}{\partial t} = [RP_1(t) - 2RP_2(t)], \quad (4.50)$$

para  $|2\rangle$ :

$$\frac{\partial P_2(t)}{\partial t} = [-RP_1(t) + 5RP_2(t) - RP_4(t)], \quad (4.51)$$

e para  $|4\rangle$ :

$$\frac{\partial P_4(t)}{\partial t} = [2RP_2(t) - 2RP_4(t)]. \quad (4.52)$$

Note que, para cada equação, a taxa de variação temporal da probabilidade  $P_i(t)$  do sistema estar em um estado  $i$  no tempo  $t$ , pode ser escrita como uma combinação linear das probabilidades de partida  $P_j(t)$  que estão relacionadas com as transições permitidas entre os estados, de  $j$  para  $i$ , multiplicada pelo elemento  $H_{ij}^*$  de  $H^*$ , que por sua vez, terá os termos de difusão e resetting imbutidos. A equação mestra pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial P_i(t)}{\partial t} = -\sum_j H_{ij}^* P_j(t). \quad (4.53)$$

Escrevendo a equação de autovalor e autovetor de  $H^*$

$$H^* v_n = \lambda_n(R) v_n, \quad (4.54)$$

onde  $v_n$  e  $\lambda_n(R)$  são os autovetores e autovalores de  $H^*$ , respectivamente. Podemos escrever a equação (4.54) explicitamente

$$\begin{bmatrix} R & -2R & 0 \\ -R & 5R & -R \\ 0 & -2R & 2R \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} v_n^{(1)} \\ v_n^{(2)} \\ v_n^{(3)} \end{bmatrix} = \lambda_n(R) \begin{bmatrix} v_n^{(1)} \\ v_n^{(2)} \\ v_n^{(3)} \end{bmatrix}. \quad (4.55)$$

donde obtemos o sistema de equações

$$\begin{cases} Rv_n^{(1)} - 2Rv_n^{(2)} + 0v_n^{(3)} = \lambda_n(R)v_n^{(1)} \\ -Rv_n^{(1)} + 5Rv_n^{(2)} - Rv_n^{(3)} = \lambda_n(R)v_n^{(2)} \\ 0v_n^{(1)} - 2Rv_n^{(2)} + 2Rv_n^{(3)} = \lambda_n(R)v_n^{(3)}, \end{cases} \quad (4.56)$$

que pode ser escrito de forma compacta como

$$\sum_j H_{ij}^* v_n^{(j)} = \lambda_n(R) v_n^{(i)}. \quad (4.57)$$

Seja  $X$  o espaço vetorial formado pelos autovetores  $\{v_{n=1}, v_{n=2}, \dots\}$ . É importante destacar que a nossa matriz  $H^*$  não é necessariamente simétrica. Por consequência deste fato, os seus autovetores não serão necessariamente ortogonais entre si. Desta forma, para termos a nossa base completa, devemos incluir os vetores  $\{d_{k=1}^T, d_{k=2}^T, \dots\}$  da base dual  $X'$  de  $X$ , de forma que estes vetores sejam as formas lineares que atuam em  $X$  [Bueno 2002], onde  $d_k^T H^* = \lambda_k d_k^T$ . Portanto, teremos o par  $(d_k^T, v_n)$  de autovetores formados por uma base dual. Assim, quando temos uma expansão do tipo:

$$P(t) = \sum_{n=1}^m c_n(t) v_n, \quad (4.58)$$

pode-se aplicar a condição inicial:

$$P(0) = \sum_{n=1}^m c_n(0)v_n. \quad (4.59)$$

Aplicando  $d_k^T$  em ambos os lados da equação (4.59) temos

$$\begin{aligned} d_k^T P(0) &= d_k^T \left[ \sum_{n=1}^m c_n(0)v_n \right] \\ &= \sum_{n=1}^m c_n(0)d_k^T v_n. \end{aligned} \quad (4.60)$$

Usando a propriedade de bi-ortonormalidade  $d_k^T v_n = \delta_{kn}$  e substituindo na equação (4.60), temos

$$\begin{aligned} d_k^T P(0) &= \sum_{n=1}^m c_n(0)\delta_{kn} \\ &= c_k(0) + 0 + \dots + 0, \end{aligned} \quad (4.61)$$

logo

$$c_k(0) = d_k^T P(0). \quad (4.62)$$

A equação (4.62) nos mostra exatamente o que a forma linear  $d_k^T$  faz. Ela mapeia um vetor  $P(0)$  para um escalar  $c_k(0)$  através de uma aplicação  $f : X \rightarrow \mathbb{R}$  [Bueno 2002]. A conexão entre a base original e a base dual é feita através da condição de biortonormalidade  $d_k^T v_n = \delta_{kn}$ , que será igual a 1 quando  $k = n$ , fazendo com que  $\lambda_k = \lambda_n$ , ou seja, ambas as bases compartilhem os mesmos autovalores. Assim, conectamos a nossa base de autovetores do tipo  $\{v_{n=1}, v_{n=2}, \dots\}$  com a base do espaço dual.

Podemos escrever a equação (4.58) em termos de  $i$  e  $j$ , obtendo:

$$P_j(t) = \sum_{n=1}^m c_n(t)v_n^j, \quad (4.63)$$

ou

$$P_i(t) = \sum_{n=1}^m c_n(t)v_n^i. \quad (4.64)$$

Assim, ambas as equações (4.63) e (4.64) estarão em função das componentes dos autovetores  $\{v_{n=1}, v_{n=2}, \dots\}$  de  $H^*$ , com coeficientes  $c_n(t)$ .

Com a função de probabilidades expandida na base dos autovetores de  $H^*$ , iremos substituir a equação (4.63) na equação mestra (4.53) para que possamos estudar o comportamento do coeficiente  $c_n(t)$ . Assim:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_i(t)}{\partial t} &= - \sum_j H_{ij}^* \left[ \sum_{n=1}^m c_n(t)v_n^j \right] \\ &= - \sum_{n=1}^m c_n(t) \left[ \sum_j H_{ij}^* v_n^j \right]. \end{aligned} \quad (4.65)$$

Substituindo a equação (4.57) em (4.65) temos:

$$\frac{\partial P_i(t)}{\partial t} = - \sum_{n=1}^m c_n(t) \lambda_n(R) v_n^i. \quad (4.66)$$

Derivando a equação (4.64) e igualando a equação (4.66) obtemos

$$\sum_{n=1}^m \frac{\partial c_n(t)}{\partial t} v_n^i = - \sum_{n=1}^m c_n(t) \lambda_n(R) v_n^i, \quad (4.67)$$

portanto,

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^m \frac{\partial c_n(t)}{\partial t} v_n^i + \sum_{n=1}^m c_n(t) \lambda_n(R) v_n^i &= 0 \\ &= \sum_{n=1}^m \left[ \frac{\partial c_n(t)}{\partial t} + c_n(t) \lambda_n(R) \right] v_n^i = 0. \end{aligned} \quad (4.68)$$

Assim, obtemos a seguinte equação diferencial:

$$\frac{\partial c_n(t)}{\partial t} = -c_n(t) \lambda_n(R), \quad (4.69)$$

cujas soluções são

$$c_n(t) = c_n(0) e^{-\lambda_n(R)t}. \quad (4.70)$$

Substituindo a equação (4.70) em (4.63) obtemos:

$$P_j(t) = \sum_{n=1}^m c_n(0) v_n^j e^{-\lambda_n(R)t}. \quad (4.71)$$

Substituindo a equação (4.71) em (4.41), podemos obter a distribuição do tempo de primeira passagem em termos dos autovalores e autovetores de  $H^*$ . A matriz  $H^*$  governa toda a dinâmica do sistema de sobrevivência, de forma que  $j$  pode ser qualquer configuração dentro do conjunto de configurações de sobrevivência. Entretanto, quando migramos para a equação (4.41), este  $j$  pode estar restrito ao conjunto dos estados que possuem transições possíveis para o absorvedor. Para o caso de duas partículas em quatro sítios, por exemplo, este conjunto será  $j = \{|1010\rangle, |0110\rangle\}$ , tendo em vista que a equação (4.41) já nos mostra que, para o FPT, o que realmente importa são estados que se conectam aos absorvedores. Desta forma:

$$f(t, R) = \sum_{\eta \neq \eta_{\text{exit}}} \sum_{\eta' = \eta_{\text{exit}}} T_{\eta \rightarrow \eta'} \left[ \sum_{n=1}^m c_n(0) v_n^j e^{-\lambda_n(R)t} \right]. \quad (4.72)$$

Reorganizando a soma, temos

$$f(t, R) = \sum_{n=1}^m \left[ \sum_{\eta \neq \eta_{\text{exit}}} \sum_{\eta' = \eta_{\text{exit}}} T_{\eta \rightarrow \eta'} c_n(0) v_n^j \right] e^{-\lambda_n(R)t}, \quad (4.73)$$

onde vamos definir:

$$\begin{aligned} \alpha_n(R) &= \sum_{\eta \neq \eta_{\text{exit}}} \sum_{\eta' = \eta_{\text{exit}}} T_{\eta \rightarrow \eta'} c_n(0) v_n^j \\ &= \sum_{\eta \neq \eta_{\text{exit}}} \sum_{\eta' = \eta_{\text{exit}}} T_{\eta \rightarrow \eta'} d_k^T P(0) v_n^j. \end{aligned} \quad (4.74)$$

portanto,

$$f(t, R) = \sum_{n=1}^m \alpha_n(R) e^{-\lambda_n(R)t}. \quad (4.75)$$

#### 4.2.3.4 Obtenção do MFPT, a partir de $f(t, R)$

Agora que temos uma função do tipo  $f(t, R)$ , podemos substituí-la na equação para o tempo médio de primeira passagem (1.2), que nos dará:

$$\begin{aligned} \langle T(R) \rangle &= \int_0^\infty t \left[ \sum_{n=1}^m \alpha_n(R) e^{-\lambda_n(R)t} \right] dt \\ &= \sum_{n=1}^m \alpha_n(R) \int_0^\infty t e^{-\lambda_n(R)t} dt. \end{aligned} \quad (4.76)$$

Portanto,

$$\langle T(R) \rangle = \sum_{n=1}^m \alpha_n(R) \left[ -\frac{t}{\lambda} e^{-\lambda_n(R)t} \Big|_0^\infty + \frac{1}{\lambda_n(R)} \int_0^\infty e^{-\lambda_n(R)t} dt \right]. \quad (4.77)$$

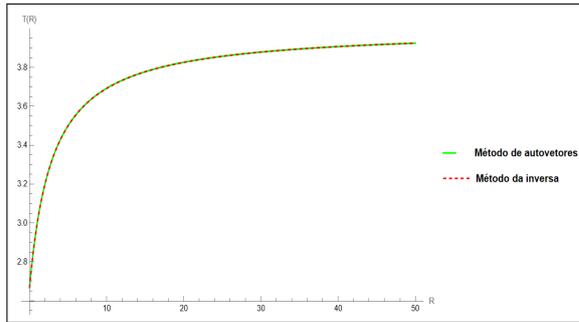
O termo  $-\frac{t}{\lambda} e^{-\lambda_n(R)t} \Big|_0^\infty$  se anula, assim como vimos anteriormente na equação (4.14), portanto:

$$\langle T(R) \rangle = \sum_{n=1}^m \frac{\alpha_n(R)}{\lambda_n^2(R)}. \quad (4.78)$$

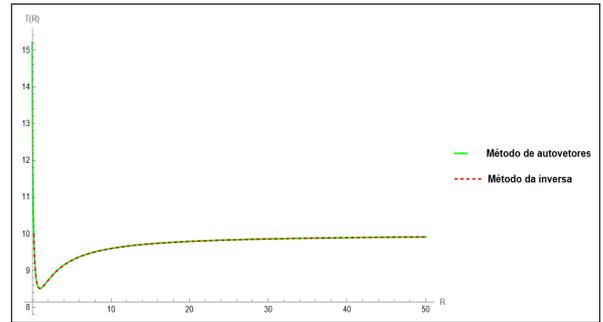
Sendo assim, basta aplicarmos a condição:

$$\frac{d}{dR} \langle T(R) \rangle = \frac{d}{dR} \left[ \sum_{n=1}^m \frac{\alpha_n(R)}{\lambda_n^2(R)} \right] = 0, \quad (4.79)$$

para encontrarmos o nosso  $R^*$  otimizado. Na Figura 17, podemos constatar a equivalência entre os métodos de Autovetores e Matriz inversa para a obtenção de  $\langle T(R) \rangle$ .



((a)) Duas partículas em quatro sítios



((b)) Duas partículas em oito sítios

Figura 17 – Exemplo de ilustração do comportamento das curvas  $\langle T(R) \rangle$  em função da taxa de reinicialização  $R$  obtidas através do método de Autovetores Eq. (4.78) e o método da Matriz inversa Eq. (4.34)

## 5 Conclusões

Os resultados obtidos neste trabalho nos levaram a constatar uma série de efeitos que a inclusão da reinicialização na difusão clássica em cadeias lineares com uso das técnicas do espaço de Fock podem causar. O uso das técnicas quânticas na mecânica estocástica se mostrou uma ferramenta bastante útil, para podermos formular uma expressão para o Quasi-Hamiltoniano total  $H'_\gamma$ . O uso deste formalismo permitiu que a análise do problema da difusão com exclusão de volume e resetting em cadeias lineares fosse feita de maneira mais simples e eficaz, sem a necessidade de realizar simulações estocásticas. Observamos que a inclusão do resetting tem consequências relevantes para a difusão nessas cadeias.

A existência de uma matriz  $H'_\gamma$  obtida via formalismo do espaço de Fock nos permitiu a análise das características dos sistemas, como a média do tempo de primeira passagem, média de ocupação e variância dos sítios, as probabilidades associadas às configurações do sistema e a distribuição de tempo de primeira passagem. Todas as características se mostraram sensíveis à introdução da reinicialização, ou seja, em cada etapa das análises feitas houve mudança de comportamento do sistema, devido à introdução da mesma. Utilizamos o software computacional Mathematica que atendeu às nossas expectativas em relação à programação simbólica e numérica que foi utilizada para a obtenção dos resultados.

Construímos uma matriz restrita ao subespaço de sobrevivência  $H^*$  que nos possibilitou explorar um ambiente em que há transições exclusivas entre os estados sobreviventes, entretanto, ainda que relacionados com os estados absorvedores. Tal matriz nos possibilitou encontrar uma expressão analítica para  $\langle T^l \rangle$  em função de  $R$ , tomando as inversas da matriz  $H^*$  e nos permitiu estabelecer comparações com MFPTs otimizados e não otimizados. A exploração da matriz  $H^*$  também nos permitiu que obtivéssemos outro método baseado na expansão espectral de  $P(t)$ , na conexão com o espaço dual dos autovalores de  $H^*$  e no conjunto de estados com transições possíveis para os estados absorvedores, que nos levou a obter  $\langle T^l \rangle$  também em função de  $R$ , que, por sua vez, se mostrou equivalente ao método das inversas.

Como perspectiva, indicamos a exploração da posição do sítio de resetting  $r$  que otimize ainda mais  $\langle T^l \rangle$  com o  $R^*$  já otimizado. Essa posição otimizada pode ser explorada através da tentativa de obtenção de uma expressão (utilizando algoritmos de busca empírica), tendo em vista que a obtenção de uma expressão analítica para  $T(r)$  seria um tanto desafiadora, mas não completamente impossível, sabendo que o espaço de estados cresce de forma combinatorial com o número de sítios e partículas. A estrutura da matriz  $H^*$  muda conforme mudamos  $r$ . Além disso, como  $r$  é um parâmetro discreto,

ou seja, só podemos ter  $r = 1, 2, 3 \dots$  números inteiros, nos leva a concluir que a forma provável é por uma abordagem semi-empírica. Possuímos também interesse em estudar a dinâmica de reinicialização em redes bidimensionais e em redes complexas de mundo real [Bueno e Hatano 2020]. Podemos também, como visto na Figura 15, estudar o motivo de termos uma taxa de reinicialização  $R^* \approx 0.25$  para qualquer número de sítios, tendo em vista que esse valor ótimo mantém a consistência mesmo quando o tamanho da cadeia se modifica significativamente.

# Referências

- BAEZ, J. C.; BIAMONTE, J. D. *Quantum techniques in stochastic mechanics*. [S.l.]: World Scientific, 2018. Citado 4 vezes nas páginas 25, 28, 30 e 32.
- BAUSE, F.; KRITZINGER, P. S. *Stochastic Petri Nets: An Introduction to the Theory*. Wiesbaden:Vieweg+Teubner Verlag, 2002. ISBN 978-3-519-00363-9. Disponível em: <<https://ls4-www.cs.tu-dortmund.de/~bause/spnbook2.html>>. Citado na página 25.
- BRESSLOFF, P. C.; NEWBY, J. M. Stochastic models of intracellular transport. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 85, n. 1, p. 135–196, 2013. Citado na página 47.
- BUENO, H. P. *Álgebra Linear – Um Segundo Curso*. Brasil: SBM, 2002. Edição de 2002. Citado 2 vezes nas páginas 55 e 56.
- BUENO, R.; HATANO, N. Null-eigenvalue localization of quantum walks on complex networks. *Phys. Rev. Res.*, American Physical Society, v. 2, p. 033185, Aug 2020. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevResearch.2.033185>>. Citado na página 60.
- BÉNICHOU, O. et al. Intermittent search strategies. *Reviews of Modern Physics*, American Physical Society, v. 83, n. 1, p. 81–129, 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/RevModPhys.83.81>>. Citado na página 35.
- DIESTEL, R. *Graph Theory*. 3rd. ed. Springer, 2005. v. 173. (Graduate Texts in Mathematics, v. 173). ISBN 978-3540261827. Disponível em: <<https://diestel-graph-theory.com/>>. Citado na página 26.
- DOI, M. Second quantization representation for classical many-particle system. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, IOP Publishing, v. 9, n. 9, p. 1465–1477, 1976. Citado na página 14.
- DUARTE-FILHO, G. C.; SANTOS, F. A.; GAFFNEY, E. A. Fock-space methods for diffusion: Capturing volume exclusion via fermionic statistics. *Physical Review E*, APS, v. 102, n. 5, p. 052101, 2020. Citado 6 vezes nas páginas 13, 14, 31, 33, 43 e 47.
- ERBAS, A.; MARKO, J. F. How do dna-bound proteins leave their binding sites? the role of facilitated dissociation. *Current Opinion in Chemical Biology*, Elsevier, v. 53, p. 118–124, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.cbpa.2019.08.007>>. Citado na página 12.
- EVANS, M. R.; MAJUMDAR, S. N. Diffusion with stochastic resetting. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 106, n. 16, p. 160601, 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.106.160601>>. Acesso em: 1 jun. 2025. Citado 7 vezes nas páginas 11, 17, 18, 19, 20, 22 e 23.
- EVANS, M. R.; MAJUMDAR, S. N.; SCHEHR, G. Predator-prey model with resetting. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, IOP Publishing, v. 55, n. 29, p. 294003, 2022. Citado na página 11.

FENNEMAN, A.; SANFEY, A. Preprint, *Memory-Based Decision-Making in Daily Life via a Random Walk Through Memory-Space: The Case for Cases*. OSF Preprints, 2022. Pré-publicação no OSF Preprints. Disponível em: <https://doi.org/10.31234/osf.io/v6yck>. Acesso em: 30 maio 2025. Disponível em: <https://doi.org/10.31234/osf.io/v6yck>. Citado na página 12.

FEYNMAN, R. P. Space-time approach to quantum electrodynamics. *Physical Review*, American Physical Society, v. 76, n. 6, p. 769–789, 1949. Citado 3 vezes nas páginas 6, 27 e 28.

JIANG, B.; YIN, J.; ZHAO, S. Characterizing human mobility patterns in a large street network. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 88, n. 2, p. 022812, 2013. Citado na página 12.

JUN, K.-S. et al. Human memory search as initial-visit emitting random walk. In: *Advances in Neural Information Processing Systems*. Montreal, Canada: Curran Associates, Inc., 2015. v. 28, p. 1072–1080. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 13.

KAISER, D. Physics and feynman's diagrams. *American Scientist*, v. 93, n. 2, p. 156–165, 2005. Disponível em: <https://web.mit.edu/dikaiser/www/FdsAmSci.pdf>. Citado na página 27.

KAMPEN, N. G. V. *Stochastic processes in physics and chemistry*. [S.l.]: Elsevier, 1992. v. 1. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 31.

NAVARRO, I.; MATÍA, F. An introduction to swarm robotics. *ISRN Robotics*, Hindawi Publishing Corporation, v. 2013, p. 1–10, 2013. Disponível em: <https://doi.org/10.5402/2013/608164>. Citado na página 13.

OLUWAFEMI, O. I.; FAMAKINWA, E. O.; BALOGUN, O. D. Random walk theory and application. *World Journal of Advanced Engineering Technology and Sciences*, ResearchGate, v. 11, n. 2, p. 346–367, 2024. Disponível em: [https://www.researchgate.net/publication/380207645\\_Random\\_walk\\_theory\\_and\\_application](https://www.researchgate.net/publication/380207645_Random_walk_theory_and_application). Acesso em: 02 jun. 2025. Disponível em: [https://www.researchgate.net/publication/380207645\\_Random\\_walk\\_theory\\_and\\_application](https://www.researchgate.net/publication/380207645_Random_walk_theory_and_application). Citado na página 12.

PAL, A.; PRASAD, V. V. First passage under stochastic resetting in an interval. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 99, n. 3, p. 032123, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.99.032123>. Acesso em: 1 jun. 2025. Citado na página 21.

PETRI, C. A. *Kommunikation mit Automaten*. Tese (Tese de Doutorado) — Technische Hochschule Darmstadt, Darmstadt, 1962. Schriften des Rheinisch-Westfälischen Instituts für Instrumentelle Mathematik an der Universität Bonn, Nr. 2. Citado na página 25.

PRESS, W. H. et al. *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*. 2. ed. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 1992. Série: Fortran Scientific Computing. ISBN 0-521-43108-5. Citado na página 35.

RAPOSO, E. P. et al. The influence of turning angles on the success of non-oriented animal searches. *Journal of Theoretical Biology*, Elsevier, v. 252, n. 1, p. 43–55, 2008. Citado na página 11.

- RAPOSO, E. P. et al. Lévy flights and random searches. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, v. 42, n. 43, p. 434003, 2009. Citado na página 11.
- RAZO, M. J. del et al. A probabilistic framework for particle-based reaction–diffusion dynamics using classical fock space representations. *Letters in Mathematical Physics*, Springer, v. 112, n. 3, p. 37, 2022. Disponível em: <<https://link.springer.com/article/10.1007/s11005-021-01492-3>>. Citado na página 14.
- ROSS, S. M. *Stochastic Processes*. 2. ed. New York: Wiley, 1996. (Wiley Series in Probability and Statistics). ISBN 9780471120629. Disponível em: <[https://books.google.com/books/about/Stochastic\\_Processes.html?id=ImUPAQAAMAAJ](https://books.google.com/books/about/Stochastic_Processes.html?id=ImUPAQAAMAAJ)>. Citado na página 24.
- ROSS, S. M. *A First Course in Probability*. 8. ed.. ed. Upper Saddle River: Pearson Prentice Hall, 2009. ISBN 9780136033134. Citado na página 36.
- SALINAS, S. R. A. *Introdução à Física Estatística*. 2. ed. São Paulo: Edusp, 2006. ISBN 978-85-314-0943-3. Citado na página 17.
- SHLESINGER, M. F.; KLAFTER, J. On growth and form. In: STANLEY, H. E.; OSTROWSKY, N. (Ed.). *On Growth and Form*. Dordrecht: Springer, 1986, (NATO ASI Series (Series E: Applied Sciences), v. 100). p. 279–283. Citado na página 11.
- SHVETS, A. A.; KOCHUGAEVA, M. P.; KOLOMEISKY, A. B. Mechanisms of protein search for targets on dna: Theoretical insights. *Molecules*, MDPI, v. 23, n. 9, p. 2106, 2018. Disponível em: <<https://www.mdpi.com/1420-3049/23/9/2106>>. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 13.
- SOUZA, D. B. d. et al. Fock-space approach to stochastic susceptible-infected-recovered models. *Physical Review E*, v. 106, p. 014136, Jul 2022. Citado na página 14.
- STROGATZ, S. H. *Nonlinear Dynamics and Chaos: With Applications to Physics, Biology, Chemistry, and Engineering*. 1st. ed. Boulder, CO: Westview Press, 1994. Citado na página 16.
- ZABINSKY, Z. B. Random search algorithms. In: *Wiley Encyclopedia of Operations Research and Management Science*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 35 e 37.
- ZHANG, Y. et al. A swarm robotic exploration strategy based on an improved random walk method. *Sensors*, v. 20, n. 2, p. 482, 2020. Disponível em: <<https://www.mdpi.com/1424-8220/20/2/482/pdf>>. Acesso em: 01 jun. 2025. Citado na página 13.