

Л.М. ХРИСТОФОРОВ

Інститут теоретичної фізики ім. Боголюбова, НАН України
(Вул. Метрологічна, 14б, Київ 03143; e-mail: lchrist@bitp.kyiv.ua)

УДК 539

**НЕПЕРЕРВНІ В ЧАСІ ВИПАДКОВІ БЛУКАННЯ
З РЕСЕТИНГОМ В ОБМЕЖЕНОМУ ЛАНЦЮЖКУ**

Детально проаналізовано модель класичних випадкових блукань з пуассонівським ресетингом в одновимірній ґратці в її загальному варіанті. Акцент зроблено на ефектах ресетингу, які виникають внаслідок різноманітності довільних початкових і граничних умов. Також обговорюється квантовий аналог моделі.

Ключові слова: випадкове блукання, низьковимірні ґратки, стохастичний ресетинг, доцільність ресетингу, квантові блукання.

1. Вступ

Якщо відомостей про місцезнаходження цілі бракує, то пошук зазвичай здійснюється випадковим чином. Якщо область пошуку велика (необмежена), то існує багато траєкторій, що робить пошук неефективним або взагалі безуспішним. Ідея підвищення ефективності пошуку шляхом ресетингу (регулярне або випадкове переривання пошуку шляхом повернення до певного стану, з якого починається новий випадковий пошук) спрямована на усунення таких “шкідливих” траєкторій. Насправді цей спосіб оптимізації пошуку є широко поширеним: від поведінки живих організмів до функціонування (біо)молекул, зокрема, ферментів.

Хоча систематичне вивчення ефектів ресетингу почалося зовсім недавно, воно швидко перетворилося на процвітаючий напрямок теорії стохастичних процесів. Після засадничої роботи [1], де пуассонівський ресетинг вивчався в базовій стохастичній моделі дифузії вздовж нескінченної лінії, з’явилися численні роботи (все ще здебільшого теоретичні) про вплив різних типів ресетингу в різних розмірностях і геометріях, за наявності різних потенціалів тощо; див. останні огляди [2–5]. Переважна більшість цих робіт стосується просторово-неперервних моделей, хоча їх дискре-

тні аналоги (випадкові блукання в ґратках або мережах) не менш важливі. Для останніх практично не було точних результатів, отриманих навіть в одновимірному випадку [6]. Навіть прямий дискретний аналог моделі з роботи [1] – ресетинг випадкових блукань в одновимірній ґратці – було розглянуто зовсім недавно [7–9]. Крім точних виразів для характеристик основних ефектів ресетингу (виникнення нерівноважного стаціонарного стану, можливість мінімізації середнього часу першого проходження (mean first passage time, MFPT)), було описано вплив обмеженості ланцюга та різних граничних умов на деякі спостережувані величини (безумовні і умовні MFPT, а також ймовірності розщеплення).

У даній роботі зроблено узагальнення результатів, отриманих в роботах [7–9], та вони доповнені дослідженням коефіцієнта варіації (coefficient of variation, CV) часу першого проходження. Крім загального значення, знання величини CV для базового (тобто без ресетингу) процесу дозволяє робити висновок про доцільність впровадження ресетингу. Отримані в цій роботі умови вигідного ресетингу відрізняються від відомого “універсального” критерію в загальному випадку. Нарешті, коротко обговорюється ресетинг в квантових блуканнях.

2. Теоретична основа**2.1. Розв’язок еволюційного рівняння**

Класичні симетричні випадкові блукання по вузлах n ($0 \leq n \leq N$) регулярного ланцюга зі стоками на його краях ($n = 0$ та $n = N$) і стохастичним пуассонівським ресетингом до вузла n_r описується

Ц и т у в а н н я: Христофоров Л.М. Неперервні в часі випадкові блукання з ресетингом в обмеженому ланцюжку. *Укр. фіз. журн.* **69**, № 8, 593 (2024).

© Видавець ВД “Академперіодика” НАН України, 2024. Стаття опублікована за умовами відкритого доступу за ліцензією CC BY-NC-ND (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

таким рівнянням еволюції для ймовірностей заповнення вузла $\rho_n(t)$:

$$\frac{d\rho_n}{dt} = k(\rho_{n-1} - 2\rho_n + \rho_{n+1}) - r\rho_n + \delta_{n_r, n} r \sum_{m=0}^N \rho_m + k\rho_0\delta_{0n} + k\rho_N\delta_{Nn} - q_0\rho_0\delta_{0n} - q_N\rho_N\delta_{Nn}, \quad (1)$$

з початковою умовою $\rho_n(0) = \delta_{n_0, n}$. Тут k – константа швидкості стрибків між сусідніми вузлами, r – така для пуассонівського ресетингу, а q_0 і q_N – відповідні інтенсивності поглинання. Невявно передбачається, що цілі розташовані у вузлах $n = -1$ та $N + 1$. Перетворення Лапласа $\tilde{\rho}_n(p) = \int_0^\infty e^{-pt} \rho_n(t) dt$ розв'язку рівняння (1) було знайдено в роботі [9]. Зокрема, для кінцевих вузлів це виглядає таким чином:

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_0(p|n_0, n_r) &= B_0(p)/2kp\Delta(p), \\ \tilde{\rho}_N(p|n_0, n_r) &= B_N(p)/2kp\Delta(p), \end{aligned} \quad (2)$$

де

$$\begin{aligned} B_0(p) &= (p\tilde{I}_{n_0} + r\tilde{I}_{n_r}) \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left[(1 - \lambda_N) \tilde{I}_0 - \tilde{I}_1 \right] \right\} + \\ &+ \frac{1}{2} (p\tilde{I}_{N-n_0} + r\tilde{I}_{N-n_r}) \left[(1 - \lambda_N) \tilde{I}_N - \tilde{I}_{N+1} \right] + \\ &+ \frac{1}{2} r\lambda_N (\tilde{I}_{n_0} \tilde{I}_{N-n_r} - \tilde{I}_{n_r} \tilde{I}_{N-n_0}), \end{aligned} \quad (3a)$$

$$\begin{aligned} B_N(p) &= (p\tilde{I}_{N-n_0} + r\tilde{I}_{N-n_r}) \times \\ &\times \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left[(1 - \lambda_0) \tilde{I}_0 - \tilde{I}_1 \right] \right\} + \\ &+ \frac{1}{2} (p\tilde{I}_{n_0} + r\tilde{I}_{n_r}) \left[(1 - \lambda_0) \tilde{I}_N - \tilde{I}_{N+1} \right] + \\ &+ \frac{1}{2} r\lambda_0 (\tilde{I}_{N-n_0} \tilde{I}_{n_r} - \tilde{I}_{n_0} \tilde{I}_{N-n_r}). \end{aligned} \quad (3b)$$

Тут $\lambda_{0,N} = q_{0,N}/k$ та

$$\begin{aligned} \Delta(p) &= \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left[(1 - \lambda_0) \tilde{I}_0 - \tilde{I}_1 - \frac{r\lambda_0}{p} \tilde{I}_{n_r} \right] \right\} \times \\ &\times \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left[(1 - \lambda_N) \tilde{I}_0 - \tilde{I}_1 - \frac{r\lambda_N}{p} \tilde{I}_{N-n_r} \right] \right\} - \\ &- \frac{1}{4} \left[(1 - \lambda_0) \tilde{I}_N - \tilde{I}_{N+1} - \frac{r\lambda_0}{p} \tilde{I}_{N-n_r} \right] \times \\ &\times \left[(1 - \lambda_N) \tilde{I}_N - \tilde{I}_{N+1} - \frac{r\lambda_N}{p} \tilde{I}_{n_r} \right]. \end{aligned} \quad (4)$$

У рівняннях (3) та (4) перетворення Лапласа модифікованих функцій Бесселя $\tilde{I}_m(s) = \tilde{I}_{-m}(s) = (s - \sqrt{s^2 - 1})^{|m|} / \sqrt{s^2 - 1}$ беруться з $s = 1 + (p + r)/(2k)$. Розв'язок (2) відповідає найбільш загальній постановці задачі та помітно спрощується у “симетричних” випадках ($q_0 = q_N = k$), для напівнескінчених чи нескінчених ланцюжків, а також у популярному випадок ресетингу до початкового вузла ($n_0 = n_r$) [7–9]. Перетворення Лапласа (2) навряд чи можна інвертувати; тим не менш, їх достатньо для обчислення практично всіх спостережуваних параметрів процесу. Перш ніж перейти до подальшого розгляду, зазначимо, що ці розрахунки можна значно спростити за допомогою так званих рівнянь відновлення [2, 4].

2.2. Рівняння відновлення

Ці рівняння пов'язують розв'язки проблем з ресетингом і розв'язки проблем без ресетингу (відповідні процеси без ресетингу часто називають базовими (underlying)). Наприклад, при збереженні ймовірності присутності блукаючої частинки в ланцюжку (зокрема, у нескінченному ланцюжку без стоків), $\sum_n \rho_n(t) = 1$, розв'язок можна записати одразу,

$$\begin{aligned} \rho_n(t|n_0, n_r, r) &= e^{-rt} \rho_{u,n}(t|n_0) + \\ &+ r \int_0^t e^{-r\tau} \rho_{u,n}(\tau|n_r) d\tau, \end{aligned} \quad (5)$$

виходячи з простих міркувань. А саме: перший доданок у правій частині рівняння (5) – це ймовірність відсутності ресетів до часу t , e^{-rt} , помножена на пропагатор базового процесу, розпочатого у вузлі n_0 , $\rho_{u,n}(t|n_0)$. Другий доданок – це ймовірність останнього ресетингу в момент часу τ , $re^{-r\tau}$, помножена на пропагатор основного процесу, розпочатого у вузлі n_r в інтервалі часу $(t - \tau, t)$, $\rho_{u,n}(\tau|n_r)$.

Рівняння (5) показує, зокрема, що ресетинг приводить до ненульового стаціонарного розподілу (це – так званий нерівноважний стаціонарний стан, non-equilibrium steady state (NESS))

$$\rho_n^{\text{st}}(n_r, r) = r \int_0^\infty e^{-rt} \rho_{u,n}(t|n_r) dt, \quad (6)$$

який не залежить від початкових умов. Для нескінченного ланцюга пропагатор базового процесу

добре відомий, $\rho_{u,n}(t|n_m) = e^{-2kt} I_{|n-m|}(2kt)$. Отже [7, 8],

$$\rho_n^{\text{st}}(n_r, r) = \frac{r}{2k} \tilde{I}_{|n-n_r|} \left(1 + \frac{r}{2k}\right),$$

що є дискретним аналогом неперервного варіанта

$$\rho_r^{\text{st}}(x|x_r) = \sqrt{\frac{r}{4D}} \exp\left(-|x-x_r| \sqrt{\frac{r}{D}}\right)$$

з вістрям в $x = x_r$ [1]. Однак асимптотика при $r \rightarrow \infty$ тепер є степенною: $\rho_n^{\text{st}}(n_r, r \rightarrow \infty) \simeq (r/k)^{-|n-n_r|}$.

За наявності процесів поглинання/розпаду рівняння відновлення (6) формулюється для ймовірності виживання $Q(t) = \sum_n \rho_n(t)$. З міркувань, подібних до тих, що використовувалися при виведенні рівняння (5), можна зробити висновок про те, що

$$Q_r(t|n_0, n_r) = e^{-rt} Q_u(t|n_0) + r \int_0^t e^{-r\tau} Q_r(t-\tau|n_0, n_r) Q_u(\tau|n_r) d\tau, \quad (7)$$

де Q_u та Q_r відповідають базовому процесові та ресетингові, відповідно.

2.3. Вирази для спостережуваності

Перетворення Лапласа рівняння (7) дає вираз

$$\tilde{Q}_r(p|n_0, n_r) = \frac{\tilde{Q}_u(p+r|n_0)}{1-r\tilde{Q}_u(p+r|n_r)}. \quad (8)$$

Він значно спрощує обчислення основних спостережуваних параметрів (МФРТ і CV). Імовірність виживання $Q(t)$ безпосередньо пов'язана з розподілом $f(t)$ часу першого проходження: $Q(t) = 1 - \int_0^t f(t') dt'$, або, для перетворення Лапласа $\tilde{Q}(p) = [1 - \tilde{f}(p)]/p$. У свою чергу, відповідний параметр МФРТ просто дорівнює $\int_0^\infty t f(t) dt = \tilde{Q}(p=0)$. Тоді з рівняння (8) випливає, що параметр МФРТ $\langle T_r \rangle$ за наявності ресетингу дорівнює

$$\langle T_r(n_0, n_r) \rangle = \frac{\tilde{Q}_u(r|n_0)}{1-r\tilde{Q}_u(r|n_r)} = \frac{1-\tilde{f}_u(r|n_0)}{r\tilde{f}_u(r|n_r)}. \quad (9)$$

Цей спосіб обчислення МФРТ набагато легший, ніж знаходження похідної від $\tilde{f}_r(p)$ у границі $p \rightarrow 0$

відповідно до стандартного визначення $\langle T^k \rangle = (-1)^k \left[d^k \tilde{f}(p) / dp^k \right]_{p=0}$.

Розрахунок параметра CV також стає значно простішим. У термінах \tilde{f}_u і \tilde{f}_r рівняння (8) можна переписати у вигляді

$$\tilde{f}_r(p|n_0, n_r) = \frac{p\tilde{f}_u(p+r|n_0) + r\tilde{f}_u(p+r|n_r)}{p+r\tilde{f}_u(p+r|n_r)}. \quad (10)$$

Взяття похідної від виразу (10) відносно p приводить до рівняння (9), тоді як друга похідна при $p = 0$ є середнім квадратом часу першого проходження і становить

$$\frac{d^2 \tilde{f}_r(p|n_0, n_r)}{dp^2} \Big|_{p=0} = \langle T_r^2(n_0, n_r) \rangle = 2 \frac{\left(1 - \tilde{f}_u(r|n_0)\right) \left(1 + r \frac{d\tilde{f}_u(r|n_r)}{dr}\right) + r\tilde{f}_u(r|n_r) \frac{d\tilde{f}_u(r|n_0)}{dr}}{r^2 \left(\tilde{f}_u(r|n_r)\right)^2}. \quad (11)$$

Отже, стандартне відхилення становить

$$\sigma_r(n_0, n_r) = \left[\langle T_r^2(n_0, n_r) \rangle - \langle T_r(n_0, n_r) \rangle^2 \right]^{1/2} = \left[1 + 2r \left(\frac{d\tilde{f}_u(r|n_r)}{dr} + \tilde{f}_u(r|n_r) \frac{d\tilde{f}_u(r|n_0)}{dr} - \tilde{f}_u(r|n_0) \frac{d\tilde{f}_u(r|n_r)}{dr} \right) - \tilde{f}_u^2(r|n_0) \right]^{1/2} / (r\tilde{f}_u(r|n_r)),$$

а коефіцієнт варіації дорівнює

$$CV_r(n_0, n_r) = \frac{\sigma_r(n_0, n_r)}{\langle T_r(n_0, n_r) \rangle} = \left[1 + 2r \left(\frac{d\tilde{f}_u(r|n_r)}{dr} + \tilde{f}_u(r|n_r) \frac{d\tilde{f}_u(r|n_0)}{dr} - \tilde{f}_u(r|n_0) \frac{d\tilde{f}_u(r|n_r)}{dr} \right) - \tilde{f}_u^2(r|n_0) \right]^{1/2} / (1 - \tilde{f}_u(r|n_r)). \quad (12)$$

Таким чином, рівняння (11), (12) містять лише перші похідні від розподілу f_u для базового процесу, взятого при $p = r$. Звернімо увагу на те, що в виразах (9) та (12), отриманих для спостережуваних величин, зберігається можливість різних початкових і ресетингових вузлів ($n_0 \neq n_r$), хоча часто цю обставину ігнорують і вважають $n_0 = n_r$

“за умовчанням”. Однак ця відмінність все ж таки має значення, за винятком стаціонарних розподілів, таких як розподіл (6). Наприклад (див. також нижче), припустимо, що існує оптимальне значення r^* , яке мінімізує МФРТ $\langle T_r \rangle$. Це означає, що $(d/dr) \langle T_r(n_0, n_r) \rangle|_{r^*} = 0$. Диференціюючи рівняння (9), маємо

$$\begin{aligned} r^* \left[\frac{d\tilde{f}_u(r|n_r)}{dr} + \tilde{f}_u(r|n_r) \frac{d\tilde{f}_u(r|n_0)}{dr} - \right. \\ \left. - \tilde{f}_u(r|n_0) \frac{d\tilde{f}_u(r|n_r)}{dr} \right]_{r^*} = \\ = \tilde{f}_u(r^*|n_r) \left[\tilde{f}_u(r^*|n_0) - 1 \right]. \end{aligned}$$

Використання цієї умови в рівнянні (12) приводить до такого коефіцієнта варіації при оптимальному ресетингові:

$$\begin{aligned} CV_{r^*}(n_0, n_r) = \\ = \frac{\left[1 + 2\tilde{f}_u(r^*|n_r) \left(\tilde{f}_u(r^*|n_0) - 1 \right) - \tilde{f}_u^2(r^*|n_0) \right]^{1/2}}{1 - \tilde{f}_u(r^*|n_0)}, \end{aligned}$$

Цей вираз перетворюється на “універсальну” властивість $CV_{r^*} = 1$ [10] тільки у випадку $n_0 = n_r$.

2.4. Коли ресетинг доцільний?

Коефіцієнт варіації CV часто пов’язують з умовою доцільності ресетингу, тобто зі здатністю останнього покращувати пошук за рахунок зменшення МФРТ. Зазвичай цю умову отримують шляхом розкладання МФРТ в ряд поблизу точки $r = 0$ [4, 11],

$$\langle T_r(n_0, n_r) \rangle = a_0 + a_1 r + a_2 r^2 + \dots \quad (13)$$

Очевидно, що a_0 – це МФРТ за відсутності ресетингу, $a_0 = \langle T(n_0) \rangle$. Також зрозуміло, що ресетинг є корисним, якщо $\langle T_r(n_0, n_r) \rangle_{r \rightarrow 0} < \langle T(n_0) \rangle$, тобто якщо $a_1 < 0$. Розкладаючи праву частину рівняння (9) в ряд поблизу $r = 0$ та маючи на увазі, що $\tilde{f}_u(0|n) = 1$ і $(d^k/dr^k) \tilde{f}_u(r|n)|_{r=0} = (-1)^k \langle T^k(n) \rangle$, отримуємо

$$\begin{aligned} \langle T_{r \rightarrow 0}(n_0, n_r) \rangle = \langle T(n_0) \rangle + [\langle T(n_r) \rangle \langle T(n_0) \rangle - \\ - \frac{1}{2} \langle T^2(n_0) \rangle] r + O(r^2). \end{aligned} \quad (14)$$

Порівнюючи вирази (13) і (14), отримуємо шукану умову доцільності,

$$\langle T(n_r) \rangle \langle T(n_0) \rangle < \frac{1}{2} \langle T^2(n_0) \rangle. \quad (15)$$

Якщо вузли n_0 та n_r співпадають, то умова (15) перетворюється на $\langle T(n_0) \rangle^2 < \frac{1}{2} \langle T^2(n_0) \rangle$ або $CV_u^2(n_0) > 1$. (16)

Співвідношення (16), яке передбачає достатньо широкий (“з товстим хвостом”, fat-tailed) розподіл $f_u(t)$ для часу першого проходження в базовому процесі, часто пропонується як “універсальна” (або принаймні достатня; див., наприклад, [4, 11]) умова. Насправді це співвідношення (як і згадана вище умова $CV_{r^*} = 1$) є таким лише у випадку ресетингу до початкового вузла (практично ніколи відповідне зауваження не робиться). Загальний “критерій вигоди”, як впливає з рівняння (15), має вигляд

$$CV_u^2(n_0) > 2 \frac{\langle T(n_r) \rangle}{\langle T(n_0) \rangle} - 1. \quad (17)$$

Іншими словами, можливі випадки, коли $CV_u^2 > 1$, але ресетинг не приносить користі, і навпаки, є доцільним, доки $CV_u^2 < 1$ (див. приклад в розділі 3). Проте в обох випадках критерій (17) залишається дійсним.

2.5. Імовірності розщеплення

Тепер ми можемо перейти до обчислення спостережуваних параметрів на основі розв’язків (2), маючи на увазі, що $f(t)$ – це не що інше, як $q_0 \rho_0(t)$ або $q_N \rho_N(t)$ у випадках одного стоку у вузлі 0 або N , відповідно. Якщо є два стоки на обох кінцях (досяжною є будь-яка з двох цілей), тоді просто $f(t) = q_0 \rho_0(t) + q_N \rho_N(t)$. Нас цікавлять МФРТ (9) і CV (12), для яких ми можемо використати $\tilde{f}_u(p)$, тобто розв’язки (2)–(4) з $r = 0$. У випадку обмеженого ланцюга з двома стоками на його кінцях існують додаткові важливі спостережувані параметри, такі як імовірності розщеплення W_0 і W_N виходу через відповідний кінцевий вузол (порів. з [12, 13]); очевидно, що $W_0 + W_N = 1$. Вони просто обчислюються за формулами

$$\begin{aligned} W_0 = q_0 \int_0^\infty \rho_0(t) dt = q_0 \tilde{\rho}_0(p \rightarrow 0), \\ W_N = q_N \int_0^\infty \rho_N(t) dt = q_N \tilde{\rho}_N(p \rightarrow 0). \end{aligned} \quad (18)$$

Окрім безумовного MFPT, також існують його умовні аналоги $\langle t_0 \rangle$ і $\langle t_N \rangle$, пов'язані з часом досягнення відповідної цілі (порів. з [14]). Їх функціями розподілу є відповідні нормовані потоки

$$f_0(t) = \frac{q_0 \rho_0(t)}{\int_0^\infty q_0 \rho_0(t) dt} = \frac{\rho_0(t)}{\tilde{\rho}_0(0)},$$

$$f_N(t) = \frac{q_N \rho_N(t)}{\int_0^\infty q_N \rho_N dt} = \frac{\rho_N(t)}{\tilde{\rho}_N(0)},$$

так що [9]

$$\langle t_0 \rangle = - \left. \frac{d \ln \tilde{\rho}_0(p)}{dp} \right|_{p=0}, \quad \langle t_N \rangle = - \left. \frac{d \ln \tilde{\rho}_N(p)}{dp} \right|_{p=0}. \quad (19)$$

3. Обчислення спостережуваних величин в окремих випадках

У цьому розділі ми наводимо результати, отримані для кількох важливих ілюстративних версій нашої досить багатопараметричної системи, визначеної рівнянням (1)¹. Спеціальний наголос робиться на нових особливостях спостережуваних, що виникають завдяки можливим відмінності між n_0 і n_r (а також між q_0 і q_N).

Корисно почати з випадку необмеженого ланцюжка. Це – практично єдиний випадок, для якого можна отримати явний вираз для еволюції в часі (5). Незважаючи на відсутність цілей на кінцях ланцюжка, можна поставити питання про MFPT, маючи на увазі перше досягнення певного (скажімо, нульового) вузла, якщо почати з вузла n_0 . Проте знаходження відповідної залежності $f_r(t)$ передбачає розв'язання допоміжної задачі для *напівнескінченного* ланцюжка ($n = 0, 1, 2, \dots$) зі стоком $q_0 = k$ у нульовому вузлі та неявну ціль у вузлі $n = -1$, так що $f_r(t|n_0, n_r) = k \rho_0(t|n_0, n_r, r)$. У цьому випадку, згідно з викладеним у розділі 2, можна отримати [9], що

$$\langle T_r(n_0, n_r) \rangle = \frac{1}{r} (\phi^{n_0+1} - 1) \phi^{n_r-n_0}, \quad (20)$$

де $\phi = 1 + (r/(2k)) + \sqrt{(r/k) + (r/(2k))^2}$. Легко перевірити, що цей MFPT є нескінченним як при

$r = 0$ (що добре відомо для дифузії вздовж нескінченної прямої і залишається справедливим для необмеженого ланцюга), так і при $r \rightarrow \infty$ ². Отже, цей параметр має мінімум при деякому скінченному оптимальному значенні r^* . Це другий (після ефекту виникнення нерівноважного стаціонарного стану) основний ефект ресетингу. У порівнянні з випадком $n_0 = n_r$, MFPT (20) містить множник $\phi^{n_r-n_0}$, і, оскільки $\phi > 1$, він збільшує (якщо $n_r > n_0$) або зменшує (якщо $n_r < n_0$) MFPT для однакових n_r і n_0 . Але навіть у випадку, коли n_0 близьке до нуля (або навіть дорівнює нулю!) і $n_r \gg n_0$, існує оптимальна швидкість ресетингу r^* , що мінімізує MFPT. Ось настільки важливим є усунення “шкідливих” траєкторій до нескінченної частини ланцюга! Принагідно зауважимо, що наші міркування застосовні у випадку, коли початковий вузол сусідє з ціллю, тоді як у безперервній моделі такий випадок неможливий (бо немає аналога сусідньої точки).

Перейдемо до аналізу обмежених ланцюгів. Спочатку розглянемо симетричні граничні умови, тобто $q_0 = q_N$. Тут обчислення ймовірностей розщеплення (18) є простими, оскільки потрібно просто взяти розв'язок (2) у границі $p \rightarrow 0$. Якщо, до того, $n_0 = n_r$, то зі зростанням r домінування W_0 або W_N (в залежності від того, який кінець ланцюжка ближче до n_r) тільки посилюється, так що при $r \rightarrow \infty$ відповідна ймовірність розщеплення досягає 1, а інша дорівнює 0. Що стосується MFPT, то його поведінка більш складна. У коротких ланцюгах і при не настільки інтенсивних стоках оптимальна швидкість ресетингу r^* може не існувати (якщо $N = 2$, то r^* відсутня для будь-якого q_0 [7, 8]). Цей висновок істотно відрізняється від результатів, отриманих у відповідній безперервній моделі, в якій r^* завжди існує при n_0 , близьких до будь-якого кінця інтервалу [14].

Якщо ресетинговий та початковий вузли різні, $n_0 \neq n_r$, то це викликає цікавий ефект інверсії ймовірностей розщеплення. Наприклад, у ланцюжку з сімома вузлами ($N = 6$), ймовірність розщеплення $W_0(r \rightarrow \infty | n_0, n_r = 2) \rightarrow 1$ для будь-якого n_0 (оскільки n_r ближче до вузла 0). Однак для $n_0 \geq 4$, коли $W_0(r = 0 | n_0, n_r = 2) < W_N(r = 0 | n_0, n_r = 2)$, збільшення r зрештою

¹ Вони були частково представлені в роботах [7–9].

² За винятком випадку $n_r = 0$, коли, вочевидь, $\langle T_{r \rightarrow \infty}(n_0, n_r = 0) \rangle = 1/k$.

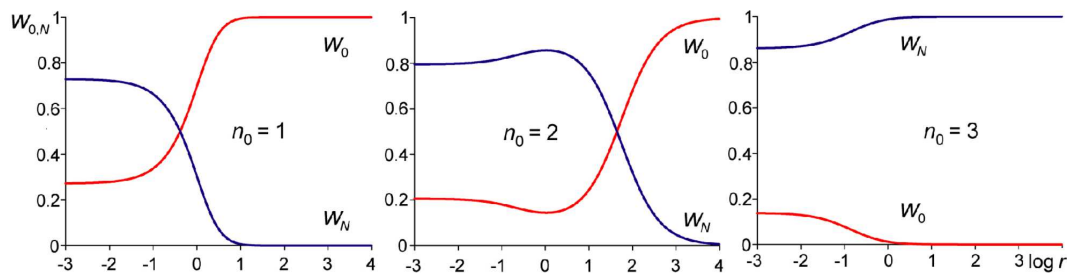


Рис. 1. Імовірності розщеплення при $N = 5, k = 0,5, q_0 = 0,05, q_N = 5$ та $n_0 = n_r$ [9]

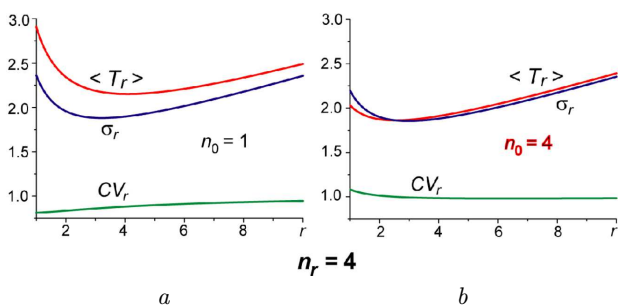


Рис. 2. MFPT, стандартне відхилення та коефіцієнт варіації як функції r для обмеженого ланцюжка з $N = 5, k = 1, q_0 = 0,1, q_N = 10$ і $n_r = 4$. (a) $n_0 = 1$, (b) $n_0 = n_r = 4$

приводить до інверсії цієї нерівності. Поведінка MFPT також змінюється. Якщо при однакових $n_0 = n_r$ оптимальна швидкість r^* існує лише для $n_0 = 1$ або 5 (того, що ближче до краю), то, наприклад, для $n_r = 1, r^*$ існує для будь-яких n_0 (за винятком, звичайно, кінцевих вузлів); див. відповідні графіки в роботі [9].

Розглянемо тепер несиметричні граничні умови, $q_0 \neq q_N$. Тут цікаві ефекти виникають навіть у коротких ланцюжках з ідентичними початковими та ресетинговими вузлами (див. приклад з $N = 2$ у роботах [7, 8]). Візьмемо, наприклад, випадок $N = 5$, де q_0 і q_N відрізняються на два порядки. При розміщенні n_0 ближче до лівого кінця ($n_0 = 0, 1, 2$) проявляється яскраво виражена інверсія W_0 і W_N зі зростанням r . Однак при $n_0 \geq 3$ вона зникає (див. рис. 1). Можливість такої інверсії, як можливість керування ресетингом, може бути важливою для різних застосувань. MFPT у такому ланцюжку з шістьма вузлами демонструє чотири якісно різні поведінки зі зростанням r , які залежать від n_0 (див. рис. 8 у роботі [9]).

Різні n_0 і n_r не додають нових форм залежності $W_{0,N}(r)$, за винятком деяких деталей. Наприклад,

при $N = 5$ розміщення $n_r = 2$ дозволяє інверсію для будь-яких n_0 від 0 до 5 , але значення $n_r = 3$ усуває її для всіх n_0 . Безумовний MFPT демонструє більш різноманітну поведінку: при $n_r = 2, r^*$ відсутня для всіх n_0 , а при $n_r = 4$, вона з'являється для будь-якого n_0 . Приклади різної поведінки умовного MFPT див. у роботі [9].

Тепер повернемося до коефіцієнта варіації та “критерію вигоди” (17). Графіки обчислених CV_r разом із σ_r і $\langle T_r \rangle$ наведені на рис. 2 для ланцюжка з $N = 5, k = 1, q_0 = 0,1, q_N = 10$ і $n_r = 4$ у двох ілюстративних випадках: $n_0 = 1 \neq n_r$ і $n_0 = 4 = n_r$. Можна бачити, що в обох випадках r^* існує, і ресетинг є вигідним. Проте з лівого графіка випливає, що $\langle T_r(1,4) \rangle$ завжди більше за $\sigma_r(1,4)$, включаючи випадок $r = 0$. Обчислення дають $\langle T(1) \rangle = \langle T_{r=0}(1,4) \rangle = 10,364$, тоді як $\sigma_u(1) = \sigma_{r=0}(1,4) = 9,110$, так що $CV_u(1) = CV_{r=0}(1,4) = 0,879 < 1$. Згідно з “універсальним” критерієм $CV_u^2 < 1$, ресетинг не повинен бути корисним; тим не менш, у цьому випадку, коли $n_0 \neq n_r$, це не так, і критерій (16) втрачає свою універсальність, як і співвідношення $CV_{r^*} = 1$.

На противагу, отриманий вище поліпшений критерій (17) залишається дійсним. Дійсно, $\langle T(4) \rangle = \langle T_{r=0}(4,4) \rangle = 4,464$, і легко перевірити, що виконується нерівність (17). У той самий час, при співпадінні $n_0 = n_r = 4$, як видно з правого графіка на рис. 2, $CV_u^2 > 1$, і критерій (16) разом з “універсальним” співвідношенням $CV_{r^*} = 1$ працюють, оскільки для оптимального значення $r^* = 2,53$ значення MFPT і стандартного відхилення збігаються, $\sigma_{r^*} = 2,53(4,4) = \langle T_{r^*} = 2,53(4,4) \rangle = 1,862$.

На цьому ми закінчуємо короткий опис особливостей класичних випадкових блукань у регулярному ланцюжку, які з'являються внаслідок пуассонівського ресетингу, і спробуємо розглянути квантові блукання в тій самій структурі.

4. Квантові блукання

Можна спробувати розглянути вплив ресетингу на квантову міграцію вздовж 1D ґратки. Для цього модель сильного зв'язку з гамільтоніаном

$$H = L \sum_n (|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|) \quad (21)$$

виглядає як правильна відправна точка. Тут $|n\rangle$ представляє стан блукаючої частинки, локалізованої на вузлі n , а L є інтегралом стрибків між найближчими сусідніми вузлами; див. рис. 3. Вважається, що $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$.

Хоча може здаватися, що ми можемо діяти подібно до того, як це робилося в попередніх розділах, незабаром стане зрозуміло, що цей шлях приносить лише деякі початкові результати. Квантовий характер блукань ставить досить складні і ще досі дискутовані питання.

Щоб проілюструвати це, почнемо розгляд з нескінченного ланцюжка, коли n у рівнянні (21) – це цілі числа від $-\infty$ до $+\infty$. У цьому випадку рівняння Шредінґера $d|\Psi(t)\rangle/dt = -iH|\Psi(t)\rangle$ ($\hbar = 1$) для хвильової функції $|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|n\rangle$ одразу зводиться до канонічного співвідношення для функцій Бесселя. Отже, за початкової умови $|\Psi(0)\rangle = |n_0\rangle$, маємо розв'язок

$$c_n(t|n_0) = (-1)^{n-n_0} J_{n-n_0}(2Lt). \quad (22)$$

Базовий пропагатор (22) є основою для розв'язання численних задач щодо руху частинок за різних граничних умов, при наявності нерегулярностей (стоків або пасток) тощо, тобто коли квантовий характер руху іноді приводить до контр-інтуїтивних результатів (див., наприклад, [12]). Еволюція ймовірності знайти частинку на вузлі n визначається діагональним елементом матриці густини $\rho(t) = |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)|$. Відповідно до рівняння (22), ця ймовірність дорівнює

$$\rho_{nn}(t|n_0) = |c_n(t|n_0)|^2 = J_{n-n_0}^2(2Lt), \quad (23)$$

і, на відміну від класичного випадку, її зменшення до 0 в границі $t \rightarrow \infty$ супроводжується коливаннями. Більш суттєву різницю можна побачити після обчислення середньоквадратичного зміщення (mean square displacement) $\text{MSD} = \sum_n (n - n_0)^2 \rho_{nn}(t|n_0)$. Використовуючи рівняння (23), отримуємо

$$\text{MSD} = 2L^2 t^2. \quad (24)$$

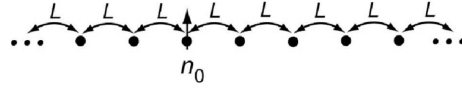


Рис. 3. Модель сильного зв'язку. Початкова умова: блукаюча частинка знаходиться на вузлі n_0

Рівняння (24) вказує на балістичний характер квантового поширення зі “швидкістю” $L\sqrt{2}$, тоді як у класичному аналогу $\text{MSD} \sim t$. Ця особливість виглядає багатообіцяючою з точки зору передбачуваної ефективності алгоритмів квантового пошуку, квантових обчислень тощо.

Спробуємо тепер впровадити ресетинг, який, як і раніше, вважається пуассонівським. Припустимо, що система з гамільтоніаном (21) знаходиться в стані $|\Psi(0)\rangle$ при $t = 0$. В інтервалі $[t, t + dt]$ система може або, з ймовірністю $r dt$, повернутися до визначеного стану ресетингу $|n_r\rangle$, або, з ймовірністю $1 - r dt$, продовжити розвиватися унітарно, відповідно до рівняння Шредінґера, як $|\Psi(t)\rangle = \exp(-iHt)|\Psi(0)\rangle$:

$$|\Psi(t + dt)\rangle = \begin{cases} |n_r\rangle & \text{з ймовірністю } r dt, \\ (1 - iH dt)|\Psi(t)\rangle & \\ \text{з ймовірністю } (1 - r dt). \end{cases}$$

Завдяки ресетингові матриця густини більше не відповідає чистому стану і повинна бути усереднена за всіма можливими ресетами в інтервалі $[0, t]$. Це, в принципі, можна зробити шляхом підсумовування відповідних нескінченних рядів [15]. Однак набагато простіше застосувати рівняння останнього відновлення (5), яке залишається справедливим і в квантовому випадку [2],

$$\rho_r(t|n_0, n_r) = e^{-rt} \rho_u(t|n_0) + r \int_0^t e^{-r\tau} \rho_u(\tau|n_r) d\tau, \quad (25)$$

де $\rho_u(t|m)$ – матриця густини системи без ресетингу, і отже $\rho_u(t|n_0) = e^{-iHt} \rho_u(0|n_0) e^{iHt}$, де $\rho_u(0|n_0) = |n_0\rangle \langle n_0|$. Очевидно, що стаціонарна матриця густини $\rho_r^{\text{st}}(n_r)$ дорівнює

$$\rho_r^{\text{st}}(n_r) = r \int_0^\infty e^{-rt} \rho_u(t|n_r) dt \quad (26)$$

і відповідає нерівноважному стаціонарному стану з порушенням детального балансу, викликаним

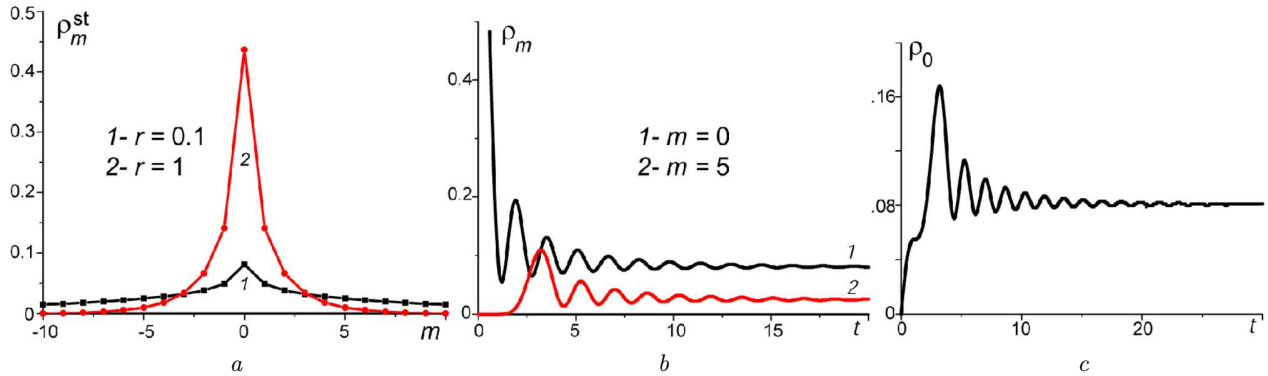


Рис. 4. Стационарні розподіли зайнятості вузлів для різних частот ресетингу до вузла $n_r = 0$. $L = 1$, $r = 0, 1$ (1) та 1 (2) (a). Еволюція деяких ймовірностей зайнятості ($n_r = 0$, $r = 0, 1$) (b, c); $n_0 = 0$ (b): ρ_0 (крива 1), ρ_5 (крива 2); $n_0 = 5$ (c)

внутрішніми потоками, які створені ресетингом. У нашому випадку матриця густини для базового процесу, $\rho_u(t|l) = \sum_{nm} c_n^*(t|l)c_m(t|l)$, включає амплітуди (22), а її діагональні елементи задані рівнянням (23). Тоді еволюційні та стаціонарні значення ймовірності присутності блукаючої частинки у вузлі n дорівнюють

$$P_n(t) \equiv [\rho_r(t|n_0, n_r)]_{nn} = e^{-rt} J_{n-n_0}^2(2Lt) + r \int_0^t e^{-r\tau} J_{n-n_r}^2(2L\tau) d\tau, \quad (27)$$

$$P_n^{\text{st}} = r \int_0^\infty e^{-rt} J_{n-n_r}^2(2Lt) dt = \frac{r}{2\pi L} Q_{n-n_r-1/2} \left(\frac{r^2}{L^2} + 1 \right), \quad (28)$$

де $Q_\nu(x)$ – функція Лежандра другого роду [16]. Такі ж результати, але отримані більш складним шляхом, нещодавно були опубліковані в роботі [15].

На рис. 4 показані приклади стаціонарного розподілу та еволюції ймовірностей заповнення деяких вузлів. Форма графіка на рис. 4, a подібна до форми стаціонарного розподілу (6) для класичних блукань у необмеженому ланцюжку з ресетингом. З ростом r цей розподіл звужується навколо n_r , що природно. Однак, як випливає з (28), його асимптотика при $r \rightarrow \infty$ є дещо іншою та пропорційною r^{-2n} замість згаданої вище залежності r^{-n} .

Кількісні характеристики локалізації, спричиненої введенням класичного стохастичного ресетингу в квантову систему, можна легко обчислити за

допомогою рівнянь (27) та (28). Зокрема, стаціонарне середнє зміщення дорівнює $\sum_n P_n^{\text{st}}(n-n_0) = n_r - n_0$, а стаціонарне середньоквадратичне зміщення $\text{MSD}^{\text{st}} = \sum_n P_n^{\text{st}}(n-n_0)^2$ дорівнює $4L^2/r^2$.

На жаль, навряд чи є можливим подальший прогрес у вивченні класичних ефектів ресетингу в квантових блуканнях вздовж одновимірної ґратки. По-перше, існує серйозна технічна перешкода для визначення ймовірностей зайнятості навіть у ланцюгах з однією нерегулярністю (наприклад, кінець, стік тощо). Немає особливої проблеми, щоб знайти перетворення Лапласа для відповідних амплітуд $\tilde{c}_n(p)$ [12]. Однак інвертувати ці перетворення або знайти з їх допомогою принаймні перетворення Лапласа для квадратів їх модулів, тобто $\tilde{\rho}_n(p)$ – це складне завдання. Ще більша, принципова перешкода полягає в неможливості правильно визначити МФРТ. Наприклад, у щойно розглянутому випадку нескінченного ланцюга неможливо сформулювати допоміжну задачу для напівнескінченного ланцюга з незворотнім переходом від кінцевого вузла до цілі, оскільки відповідну швидкість переходу не можна побудувати за допомогою єдиного параметра L квантово-механічного резонансного обміну. Отже, неможливо правильно ввести функцію розподілу $f(t) = \kappa\rho_0(t)$, бо зовсім незрозуміло, що таке κ .

Ці міркування, а також додаткові міркування щодо особливостей квантових вимірювань привели до перевизначення як поняття МФРТ (замінивши ним поняття середнього часу першої ресетрації), так і самого ресетингу (замінивши його на *проективні вимірювання* на певному вузлі). Зараз інтенсивно обговорюються різні підходи в цьому на-

прямку. Це виходить за рамки цієї статті; щодо відповідних останніх робіт, див. роботи [3, 17, 18] та наведені там посилання.

5. Заключні зауваження

Випадкові блукання в одновимірній ґратці належать до основних моделей теорії випадкових процесів, які широко використовуються для численних застосувань у дуже різноманітних галузях науки. Ця робота є найбільш повним (на сьогоднішній день) аналізом впливу пуассонівського ресетингу на такі випадкові блукання в ланцюжках довільної довжини за довільних початкових і граничних умов. Точні аналітичні вирази для залежності основних спостережуваних параметрів (безумовних та умовних MFPT, ймовірностей розщеплення, коефіцієнтів варіації) від середньої частоти ресетингу дозволяють виявити різноманітні нових ефектів ресетингу, спричинених різними розташуваннями початкового, n_0 , та ресетингового, n_r , вузлів, або різними граничними умовами на кінцях ланцюжка. Зокрема, можливість інвертування відношення W_0/W_N між ймовірностями розщеплення шляхом зміни швидкості ресетингу (тобто перетворення “небажаного” результату в “бажаний”) ілюструє можливість керування за допомогою ресетингу. Виведена умова доцільності ресетингу (узагальнення “універсального” критерію $CV_u > 1$ на випадок $n_0 \neq n_r$) показує, що ресетинг може покращити пошук навіть при вузькому розподілі $f_u(t)$ часів першого проходу в базовому процесі, коли $CV_u < 1$.

Що стосується квантових блукань, то можна простежити вплив класичного ресетингу на хід формування нерівноважного стаціонарного стану в нескінченному ланцюжку без стоків. Однак спроби впровадити спостережувані, подібні до таких у класичних випадкових блуканнях, вимагають перевизначення таких понять як MFPT, так і самого ресетингу.

Ця робота, як і практично всі роботи, виконані досі в цій царині, має переважно академічний характер³. Деякі аспекти, пов’язані з ферментативним каталізом і конформаційно-розгалуженими

схемами Міхаеліса–Ментена, обговорюються в роботах [8, 9, 21]. Огляд потенційних застосувань моделей зі стохастичним ресетингом у широкому колі мультидисциплінарних задач можна знайти в роботі [4]. Незважаючи на відсутність прямих експериментів щодо, наприклад, (біо)молекулярних реакцій або транспортних систем молекулярної електроніки, перші спостереження дифузії з ресетингом [22, 23] разом з вже розробленою технікою отримання статистичних характеристик одномолекулярних реакцій не залишають сумнівів у використанні накопичених теоретичних результатів для різних реальних систем з ресетингом.

Робота виконана в рамках проекту 0121U109816 НАН України. Автор висловлює вдячність фонду Саймонса за часткову підтримку.

1. M.R. Evans, S.N. Majumdar. Diffusion with stochastic resetting. *Phys. Rev. Lett.* **106**, 160601 (2011).
2. M.R. Evans, S.N. Majumdar, G. Schehr. Stochastic resetting and applications. *J. Phys. A* **53**, 193001 (2020).
3. A. Nagar, S. Gupta. Stochastic resetting in interacting particle systems: A review. *J. Phys. A* **56**, 283001 (2023).
4. A. Pal, V. Stojkoski, T. Sandev. Random resetting in search problems. *arXiv:2310.12057v2* (2023).
5. S. Gupta, A. Jayannavar. Stochastic resetting: A (very) brief review. *Front. Phys.* **10**, 789097 (2022).
6. O.L. Bonomo, A. Pal. First passage under restart for discrete space and time: application to one-dimensional confined lattice random walks. *Phys. Rev. E* **103**, 052129 (2021).
7. Л.М. Христофоров. Випадкове блукання з поверненням в одновимірному ланцюжку. *Допов. Нац. акад. наук Укр.* № 8, 43 (2020).
8. L.N. Christophorov. Peculiarities of random walks with resetting in a one-dimensional chain. *J. Phys. A* **54**, 015001 (2021).
9. L.N. Christophorov. Resetting random walks in one-dimensional lattices with sinks. *J. Phys. A* **55**, 155006 (2022).
10. S. Reuveni. Optimal stochastic restart renders fluctuations in first passage times universal. *Phys. Rev. Lett.* **116**, 170601 (2016).
11. A. Pal, V.V. Prasad. Landau-like expansion for phase transitions in stochastic resetting. *Phys. Rev. Res.* **1**, 032001 (2019).
12. L.N. Christophorov, A.G. Zagorodny. Peculiarities of migration and capture of a quantum particle in a chain with traps. *Chem. Phys. Lett.* **682**, 77 (2017).
13. L.N. Christophorov, V.N. Kharkyanen. Theory of interimpurity transitions in condensed medium. *Phys. stat. sol (b)* **116**, 415 (1983).

³ За допомогою представлених виразів можуть бути негайно обчислені більш конкретні статистичні характеристики випадкових блукань, подібні до досліджених в роботах [19, 20].

14. A. Pal, V.V. Prasad. First passage under stochastic resetting in an interval. *Phys. Rev. E* **99**, 032123, (2019).
15. D. Das, S. Dattagupta, S. Gupta. Quantum unitary evolution interspersed with repeated non-unitary interactions at random times: The method of stochastic Liouville equation, and two examples of interactions in the context of a tight-binding chain. *J. Stat. Mech.: Theory Exp.* 053101 (2022).
16. H. Bateman. *Tables of Integral Transforms. Vol. 1* (McGraw-Hill, 1954).
17. R. Yin, E. Barkai. Restart expedites quantum walk hitting times. *Phys. Rev. Lett.* **130**, 050802 (2023).
18. M. Kulkarni, S.N. Majumdar. First detection probability in quantum resetting via random projective measurements. *J. Phys. A* **56**, 385003 (2023).
19. J. Klinger, R. Voituriez, O. Bénichou. Distribution of the span of one-dimensional confined random processes before hitting a target. *Phys. Rev. E* **103**, 032107 (2021).
20. G.R. Calvert, M.R. Evans. Searching for clusters of targets under stochastic resetting. *Eur. Phys. J. B* **94**, 228 (2021).
21. Л.М. Христофоров. Вплив від'єднання субстрату на кінетику ферментативного каталізу. *Допов. Нац. акад. наук Укр.* № 1, 40 (2019).
22. B. Besga, A. Bovon, A. Petrosyan, S. N. Majumdar, S. Ciliberto. Optimal mean first-passage time for a Brownian searcher subjected to resetting: Experimental and theoretical results. *Phys. Rev. Res.* **2**, 032029 (2020).
23. O. Tal-Friedman, A. Pal, A. Sekhon, S. Reuveni, Y. Roichman. Experimental realization of diffusion with stochastic resetting. *J. Phys. Chem. Lett.* **11**, 7350 (2020).

Одержано 15.08.24.
Переклад на українську мову О. Войтенка

L.N. Christophorov

CONTINUOUS TIME RANDOM WALKS
WITH RESETTING IN A BOUNDED CHAIN

The model of classical random walks with Poissonian resetting in a one-dimensional lattice is analyzed in detail in its general version. A special emphasis is made on the resetting effects that emerge due to the variety of arbitrary initial and boundary conditions. A quantum analog of the model is also discussed.

Keywords: random walk, low-dimensional lattices, stochastic resetting, resetting expediency, quantum walks.