



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICA

ENUMERACIÓN EXACTA PARA TIEMPOS DE ENCUENTRO DE CAMINANTES
ALEATORIOS CONFINADOS

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:
PAULINA SOLÍS CARMONA

TUTOR PRINCIPAL
DAVID PHILIP SANDERS
FACULTAD DE CIENCIAS

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTORAL

DR. DENIS PIERRE BOYER
INSTITUTO DE FÍSICA

DR. HERNÁN LARRALDE RIDAURA
INSTITUTO DE CIENCIAS FÍSICA

MÉXICO, D. F. FEBRERO 2015



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Dedicatoria

*A mis padres
Manuel Solís Andrade y
Paulina Carmona Carvajal*

Agradecimientos

A mis padres, por confiar en mi, por ser mi soporte, por ser mi inspiración de seguir adelante y por tantas cosas que me han brindado que no terminaría de escribirlas.

A mis hermanos Vicky, Lolin, Tomas y Porfirio por su apoyo incondicional, consejos, confianza y por siempre estar al pendiente de su hermanita menor.

A mis sobrinos, Julissa, Steyci, Manuel, Diego, Alexander y Angel, por estar al pendiente de mi, por su cariño y admiración.

A mis amigos y personas que conocí durante la maestría, por su apoyo, compañía y por siempre estar al pendiente en todos los sentidos, en especial a Israel Torres, Alejandro Perez y Antonio Tavera.

A mi director de tesis el Dr. David Philip Sanders, por darme la oportunidad de trabajar con él, por su dedicación, paciencia y su invaluable apoyo para realizar esta tesis; gracias David, gracias por tus consejos y por todo lo que me enseñaste.

A los sinodales Dr. Irving Morales, Dr. Enrique Hernández, Dr. Luis Benet y Dr. Carlos Gershenson, por dedicarle tiempo a leer mi trabajo y por enriquecerlo con sus correcciones. A los profesores de la maestría por los conocimientos que me brindaron.

Agradezco una beca por parte del proyecto DGAPA-UNAM PAPIIT IN116212 para la redacción de esta tesis.

Índice general

Dedicatoria	I
Agradecimientos	III
Resumen	IX
1. Introducción	1
1.1. Caminantes aleatorios	2
1.2. Modelo de caminantes confinados en regiones traslapantes	3
1.3. Métodos numéricos utilizados	4
1.4. Plan de la tesis	6
2. Antecedentes	9
2.1. Caminantes aleatorios	9
2.2. Variables aleatorias discretas	10
2.2.1. Valor esperado y varianza de una variable aleatoria discreta	11
2.3. Ecuación maestra para un caminante aleatorio	11
2.4. Enumeración exacta para un solo caminante	12

2.4.1.	Absorción en un sitio meta	12
3.	Modelo de caminantes aleatorios confinados en territorios que se traslapan y el método de Monte Carlo	15
3.1.	Modelo de caminantes aleatorios confinados en territorios que se traslapan	16
3.1.1.	Modelo en una dimensión	16
3.1.2.	Modelo en dos dimensiones	17
3.2.	Tiempos de primer encuentro	17
3.3.	Método de Monte Carlo	18
3.3.1.	Algoritmo del método de Monte Carlo	19
4.	Enumeración exacta para tiempos de encuentro de dos caminantes aleatorios	21
4.1.	Mapeo de dos caminantes a un caminante en el doble de dimensiones . . .	21
4.1.1.	Mapeo de dos caminantes en 1D a un caminante en 2D	22
4.1.2.	Encuentros y sitios meta	22
4.1.3.	Mapeo de dos caminantes en 2D a un caminante en 4D	24
4.2.	Planteamiento del método de enumeración exacta para encuentros de dos caminantes aleatorios	25
4.3.	Algoritmo del método de enumeración exacta	25
4.4.	Implementación del método de enumeración exacta	26
4.4.1.	Condiciones iniciales	26
4.4.2.	Fronteras extendidas	27
4.5.	Validación de enumeración exacta	31

4.6. Cálculo del valor esperado y la condición de terminación del algoritmo . .	31
4.7. Varianza	36
5. Resultados para tiempos de primer encuentro	39
5.1. Tiempos de encuentro para dos caminantes en una dimensión	39
5.2. Tiempos de primer encuentro de dos caminantes en dos dimensiones . . .	43
5.2.1. Resultados para diferentes valores del traslape cambiando el tamaño del hábitat	46
Conclusiones	51
Bibliografía	53

Resumen

Motivados por la propagación de enfermedades y las reacciones químicas, se estudian los tiempos de primer encuentro de caminantes aleatorios confinados, en un modelo en el cual dos caminantes se mueven en una o dos dimensiones y cada uno vive en su respectiva región o hábitat. Las regiones se traslapan, y los caminantes se pueden encontrar sólo en la región de traslape. Se calculan numéricamente los tiempos de primer encuentro en función de los parámetros del sistema: los tamaños de las regiones en donde se mueven los caminantes, y de la región de traslape entre ellas. Para encontrar el tiempo de primer encuentro se utilizan dos métodos: el método de Monte Carlo y el método de enumeración exacta. El segundo método se implementó para obtener de manera numéricamente exacta la distribución de probabilidad completa de los tiempos de encuentro, y de ahí su promedio y varianza.

Capítulo 1

Introducción

Este trabajo se enfoca en estudiar los tiempos de primer encuentro de dos caminantes aleatorios que se encuentran confinados. Los tiempos de primer encuentro son fundamentales para una gran cantidad de fenómenos. Algunos de los ejemplos en los cuales se involucran procesos de primer pasaje son: las reacciones químicas [1] y las reacciones bioquímicas adentro de células [2]; la búsqueda de comida en los animales [3]; la dinámica neuronal [4]; y la propagación de epidemias [5].

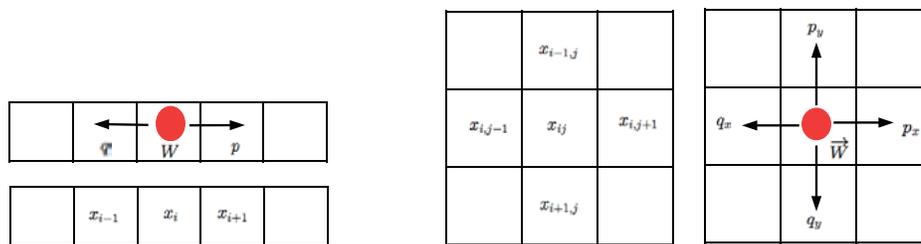
En el caso de las reacciones químicas, pensemos en dos moléculas que sufren una reacción al colisionar. Para que pase esto, primero las moléculas deben encontrarse. Si se mueven dentro de un medio acuoso, cada una sigue un movimiento browniano, es decir, un movimiento aleatorio que resulta de los choques incesantes de la partícula pesada sumergida en un fluido compuesto por partículas ligeras.

En el caso de la propagación de epidemias o epizootias (el equivalente a las epidemias en poblaciones de animales), los animales se pueden modelar, en una primera aproximación, como caminantes aleatorios. Cuando un caminante sano se encuentra con uno infectado, puede tener lugar el contagio. La tasa de contagio se puede relacionar con la velocidad con la que se propaga una epizootia en el espacio [5].

Un modelo simple que reproduce ciertos fenómenos consiste en tratar a las moléculas o los animales como *caminantes aleatorios*, es decir, que se mueven en el espacio de forma azarosa.

1.1. Caminantes aleatorios

Un *caminante aleatorio* tiene una trayectoria que consiste en una secuencia de pasos aleatorios, por ejemplo sobre una red. En el caso más sencillo, el de un caminante sin memoria, en cada paso se mueve a la izquierda o a la derecha con igual probabilidad (caso simétrico) en una dimensión; y arriba, abajo, izquierda o derecha con igual probabilidad en dos dimensiones; ver la figura 1.1. En la figura 1.2 se muestran trayectorias de un caminante aleatorio discreto en una y dos dimensiones.



(a) Caminata aleatoria en una dimensión (b) Caminata aleatoria en dos dimensiones

Figura 1.1: (a) En una dimensión, con probabilidad p el caminante se mueve a la derecha y con probabilidad q se mueve a la izquierda. (b) En dos dimensiones, con probabilidades p_x , p_y el caminante se mueve derecha o arriba, y con probabilidades q_x , q_y se mueve izquierda o abajo. W (en 1D) y \vec{W} (en 2D) denotan la posición del caminante; $q + p = 1$.

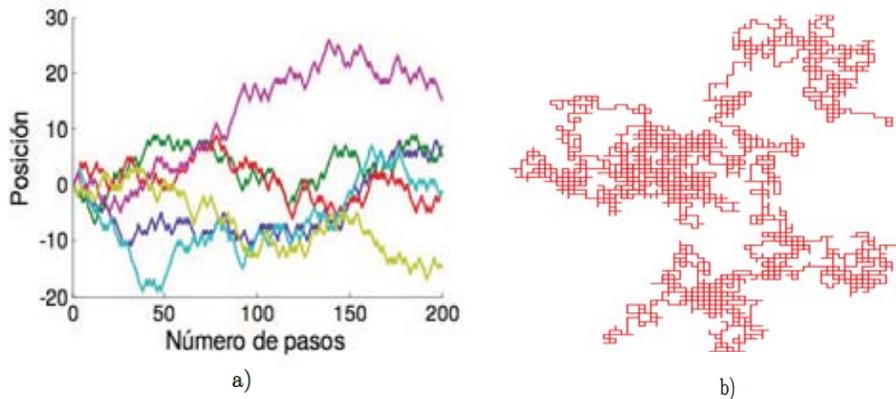


Figura 1.2: Trayectorias de (a) varias caminatas aleatorias en una dimensión, como función del tiempo; (b) una caminata aleatoria en dos dimensiones.

1.2. Modelo de caminantes confinados en regiones traslapantes

Ocuparemos un modelo de dos caminantes aleatorios confinados, en el cual cada caminante vive en su propia región, motivado en los hábitats de animales territoriales [6, 5]. Las dos regiones de los dos caminantes se traslapan en una región dada.

En los sistemas reales, ya sea una célula o el territorio de un animal, la geometría de la región en la cual se encuentra confinado cada caminante es irregular, y además puede variar en el tiempo [7]. En esta tesis, como primera aproximación, se utilizan regiones de forma sencilla (rectangular) con traslapes rectangulares, y con fronteras reflejantes (es decir, tal que un caminante rebota al llegar a una frontera, y se queda donde estaba).

El objetivo es encontrar los *tiempos de primer encuentro*, es decir, cuándo los caminantes se *encuentran* por primera vez, estando en el mismo sitio al mismo tiempo. Dada la geometría particular del modelo, los encuentros entre los dos caminantes pueden ocurrir

sólo en la región de traslape.

1.3. Métodos numéricos utilizados

Para calcular los tiempos de primer encuentro, se utilizan dos métodos numéricos: el de *Monte Carlo* y el de *enumeración exacta*. En particular, en esta tesis se desarrolla el método de enumeración exacta para calcular la distribución de probabilidad de los tiempos de encuentro de dos caminantes aleatorios confinados.

El nombre del método de *Monte Carlo* fue acuñado por John Von Neumann y Stanislaw Ulam [8], cuando trabajaban en el proyecto Manhattan durante la Segunda Guerra Mundial. Bajo el nombre de Método Monte Carlo se agrupan una serie de procedimientos que analizan distribuciones de variables aleatorias usando simulación con números aleatorios. El Método de Monte Carlo da solución a una gran variedad de problemas matemáticos, haciendo experimentos con muestreos estadísticos en una computadora [8].

El método de *enumeración exacta* fue propuesto en 1984 por I. Majid et al. [9]. Este método se utiliza para calcular la distribución de probabilidad de la posición de un caminante aleatorio en cada paso de tiempo de manera exacta, dada una ecuación maestra que describe la evolución local de la probabilidad en el espacio. El método fue extendido en 2007 por O. Bénichou et al. [10] para poder calcular la distribución de probabilidad de los tiempos de primer paso de un sitio fuente a un sitio meta. En esta tesis, introducimos una extensión más del método, la cual permite obtener de manera numéricamente exacta la distribución de probabilidad de los tiempos de primer encuentro de dos caminantes aleatorios.

El método de Monte Carlo produce una trayectoria posible del sistema en cada realización. Con enumeración exacta, por otro lado, es como si simuláramos un número infinito de caminantes y contáramos qué proporción se encuentran en cada sitio i en cada

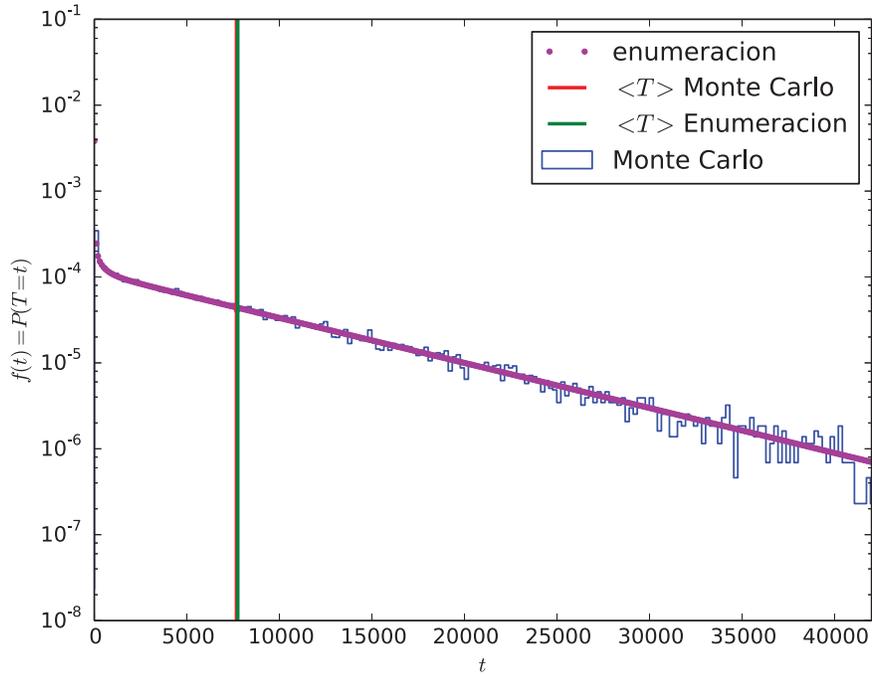


Figura 1.3: Comparación del histograma de los tiempos de primer encuentro para $m = 10$ y $\ell = 50$ obtenidos con Monte Carlo, con los resultados de enumeración exacta.

tiempo t .

El método de enumeración es más preciso que Monte Carlo, ya que en una sola corrida produce la distribución de probabilidad completa y exacta para una condición inicial dada, mientras que en Monte Carlo necesitamos muchas corridas y el valor obtenido solamente es aproximado.

El objetivo de realizar el mismo cálculo con dos métodos diferentes es el poder comparar los resultados, y saber si los algoritmos sirven y se implementaron de forma adecuada. Dado que es más sencillo trabajar con Monte Carlo, se recurrió a éste para poder comparar los resultados obtenidos con enumeración exacta.

Como ejemplo del tipo de resultados obtenidos, la figura 1.3 muestra una compara-

ción de la distribución de probabilidad de tiempos de encuentro en una geometría particular, obtenida tanto con Monte Carlo como con enumeración exacta. Vemos que el método de enumeración exacta permite obtener una distribución de probabilidad sin ruido, mientras que con Monte Carlo no importa cuántas realizaciones hagamos, siempre tendremos ruido. Es por ello que es de interés desarrollar el método de enumeración exacta, cuya implementación computacional es, sin embargo, mucho más elaborada.

1.4. Plan de la tesis

En el capítulo 2, se presentan las herramientas matemáticas necesarias para estudiar el problema. En el capítulo 3, estudiamos el modelo y su implementación con el método de Monte Carlo. En el capítulo 4, se presenta la meta principal de la tesis: el desarrollo del método de enumeración exacta y su implementación para calcular la distribución de probabilidad de los tiempos de encuentro de dos caminantes aleatorios. En el capítulo 5, se presentan algunos resultados numéricos obtenidos para los tiempos de encuentro en una y dos dimensiones, calculados tanto con Monte Carlo como con enumeración exacta. Finalmente, en el último capítulo se presentan las conclusiones.

Capítulo 2

Antecedentes

En este capítulo presentaremos algunas herramientas matemáticas que se requieren para el estudio de los caminantes aleatorios.

2.1. Caminantes aleatorios

Una forma conveniente y flexible de aproximar a las moléculas o a los animales es mediante caminantes aleatorios. La caminata aleatoria es un formalismo matemático que consiste en una trayectoria formada por pasos sucesivos tomados al azar. Desde su introducción [11], se ha vuelto una herramienta muy exitosa; hoy día se utiliza en ramas de la ciencia tan diversas como la física, la economía, las ciencias de la computación, la biología y la química [12, 13, 14, 15]. En el caso más sencillo, la posición al tiempo $t + 1$ depende solamente de la posición que se tenía al tiempo t (es decir, se cumple la propiedad de Markov), y el proceso no tiene memoria.

Un modelo sencillo en una dimensión consiste en un caminante que se mueve a la derecha con probabilidad p y a la izquierda con probabilidad $q := 1 - p$, respectivamente. En el caso simétrico, la probabilidad es la misma en ambas direcciones ($p = q = \frac{1}{2}$). Así,

la posición X_t del caminante al tiempo t está dada por

$$(2.1) \quad X_{t+1} = X_t + \Delta_t,$$

en donde Δ_t denota el brinco que da el caminante al tiempo t , lo cual es una variable aleatoria que toma los valores ± 1 , con probabilidades $P(\Delta_t = +1) = p$ y $P(\Delta_t = -1) = q$.

Si el caminante se mueve en dos dimensiones, se puede mover arriba, abajo, izquierda o derecha con probabilidad $\frac{1}{4}$, en el caso más sencillo.

2.2. Variables aleatorias discretas

Una variable aleatoria *discreta* X es una función $X : \Omega \rightarrow \mathbb{N}$, tal que a cada elemento del espacio muestral Ω (correspondiente al experimento aleatorio que estemos estudiando) se le hace corresponder un número natural [16]. Es decir, una variable aleatoria X es discreta cuando puede tomar sólo un número numerable de valores x_1, \dots, x_n, \dots [16]. Por ejemplo, la posición de un caminante aleatorio toma valores en los enteros, y al estar éste confinado toma un número finito de valores.

La *distribución de probabilidad* de una variable aleatoria discreta X queda caracterizada por la *función de masa* $f(x)$, que es la probabilidad de que X tome el valor x :

$$(2.2) \quad f(x) := P(X = x).$$

En general, $f(x)$ es una función de masa si satisface las siguientes dos propiedades:

1. $f(x) \geq 0$ para toda x (positividad);
2. $\sum_i f(x_i) = 1$ (normalizabilidad).

2.2.1. Valor esperado y varianza de una variable aleatoria discreta

Un concepto muy importante en probabilidad y estadística es el de valor esperado. Para una variable aleatoria discreta X que toma los valores x_1, \dots, x_n , el *valor esperado* de X se define como [17]

$$(2.3) \quad \langle X \rangle := x_1 P(X = x_1) + \dots + x_n P(X = x_n) = \sum_{j=1}^n x_j P(X = x_j);$$

aquí, la suma se toma sobre todos los valores posibles de X .

La *varianza* de una variable aleatoria es una medida de dispersión, es decir de cómo los datos difieren respecto a su valor esperado. Se define como

$$(2.4) \quad \text{Var}(X) = \langle (X - \mu)^2 \rangle = \langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2,$$

donde $\mu := \langle X \rangle$ es el valor esperado. Si X es una variable aleatoria discreta con función de probabilidad $f(x)$, entonces la varianza es [17]

$$(2.5) \quad \text{Var}(X) = \sum_{j=1}^n (x_j - \mu)^2 f(x_j).$$

2.3. Ecuación maestra para un caminante aleatorio

La *ecuación maestra* describe la evolución temporal de la distribución de probabilidad de un sistema estocástico. Para un caminante aleatorio desplazándose en tiempo discreto sobre una red, la ecuación maestra es

$$(2.6) \quad P(\mathbf{r}, t + 1) = \frac{1}{z(\mathbf{r})} \sum_{\mathbf{r}' \in N(\mathbf{r})} P(\mathbf{r}', t).$$

Aquí, $P(\mathbf{r}, t)$ es la probabilidad de que el caminante aleatorio esté en la posición \mathbf{r} al tiempo t , $N(\mathbf{r})$ es el conjunto de sitios vecinos de \mathbf{r} y $z(\mathbf{r})$ es el número de vecinos.

2.4. Enumeración exacta para un solo caminante

En 1984, I. Majid et al. [9] propusieron el método de *enumeración exacta*. Este método numérico permite calcular, de forma numéricamente exacta, la distribución de probabilidad completa para la posición de un caminante aleatorio en cualquier tiempo t ; es decir, resuelve la ecuación maestra (2.6), al evolucionar la probabilidad en cada sitio. El método se visualiza en la figura 2.2.

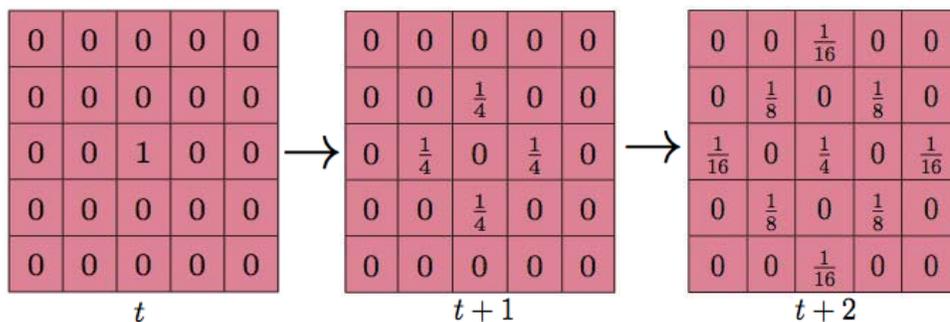


Figura 2.1: Evolución de la probabilidad en el espacio durante dos pasos de tiempo según la ecuación maestra / método de enumeración exacta, desde una condición inicial concentrada en un solo sitio. Se muestra cómo se distribuye la probabilidad de cada sitio a sus sitios vecinos en el paso siguiente.

2.4.1. Absorción en un sitio meta

O. Bénichou et al. [10, Apéndice E] extendieron el método de enumeración exacta al caso en el cual un caminante parte de un sitio fuente \mathbf{r}_F y se absorbe en un sitio absorbente o sitio meta \mathbf{r}_M (también llamado trampa). Mostraron cómo utilizar el método

para calcular la probabilidad de que el caminante se absorba en cada paso de tiempo, y así calcular la distribución de probabilidad de tiempos de absorción o tiempos de *primer paso*, $\varphi(t) := P(T = t)$, donde T denota el tiempo de primer paso (una variable aleatoria).

La idea del método es pensar en $P(\mathbf{r}, t)$ de otra manera: ahora representará la probabilidad de que el caminante esté en el sitio \mathbf{r} al tiempo t y *no haya llegado aún al sitio meta* \mathbf{r}_M .

En cada tiempo t , hay una probabilidad $P(\mathbf{r}_M, t)$ de que el caminante llegue al sitio meta \mathbf{r}_M . Es la probabilidad de que la *primera* llegada al sitio meta \mathbf{r}_M sea igual a t . Por lo tanto, ponemos

$$(2.7) \quad \varphi(t) := P(\mathbf{r}_M, t).$$

Ahora es crucial *remover* esta probabilidad del sistema, es decir, se asigna $P(\mathbf{r}_M, t) := 0$. Intuitivamente, esto corresponde a que hay una fuga, o escape, de probabilidad desde el sistema.

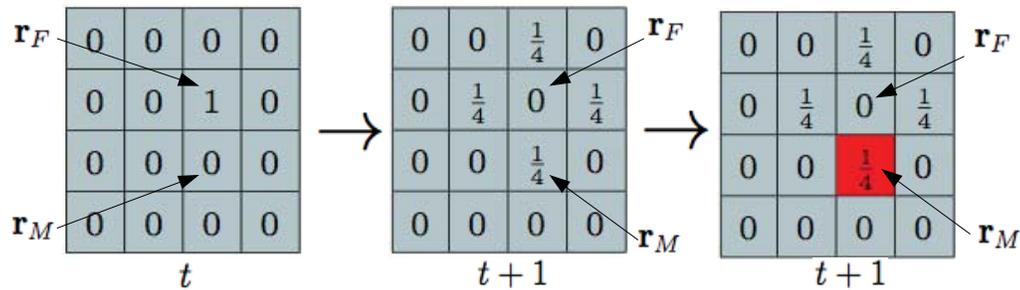


Figura 2.2: Evolución de la probabilidad en un paso de tiempo con el método de enumeración exacta con un sitio absorbente. En el tercer cuadro, la probabilidad que llega al sitio meta se hace cero.

La figura 2.2 muestra un ejemplo de cómo funciona el método de enumeración exacta en presencia de un sitio absorbente.

Capítulo 3

Modelo de caminantes aleatorios confinados en territorios que se traslapan y el método de Monte Carlo

En este capítulo, se presenta en detalle el modelo de dos caminantes aleatorios confinados que ocuparemos, en una y dos dimensiones. Además, se presenta la aplicación del método de Monte Carlo a este modelo.

El modelo que estudiaremos de dos caminantes aleatorios en territorios que se traslapan fue propuesto por L. Giuggioli et al. [5, 6]. Este modelo lo emplearemos en una y dos dimensiones.

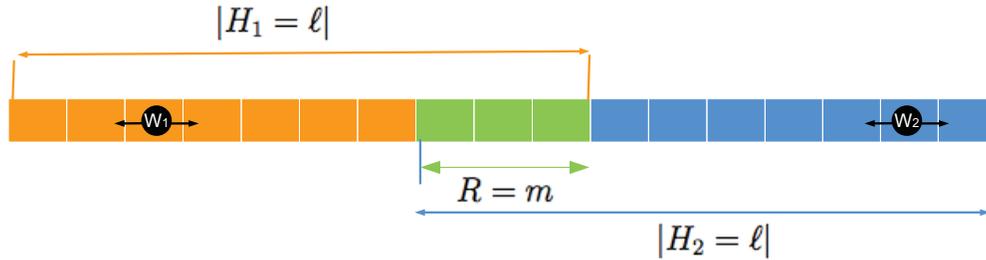


Figura 3.1: Modelo en una dimensión: dos caminantes aleatorios, sus posiciones denotadas por $W_1(t)$ y $W_2(t)$, moviéndose en sus respectivos hábitats H_1 y H_2 de tamaño ℓ que se traslapan en una región R de tamaño $m > 0$. Los hábitats tienen fronteras reflejantes.

3.1. Modelo de caminantes aleatorios confinados en territorios que se traslapan

3.1.1. Modelo en una dimensión

En una dimensión el modelo consiste en dos caminantes que están confinados en sus propios hábitats H_1 y H_2 , respectivamente, los dos de tamaño ℓ , en una red unidimensional. Los hábitats se traslapan en una región unidimensional R de tamaño $m > 0$. Las posiciones de los caminantes al tiempo (discreto) t se denotan por $W_1(t) \in \mathbb{Z}$ y $W_2(t) \in \mathbb{Z}$. En la figura 3.1 se muestra este caso.

Fronteras reflejantes

Los hábitats de los caminantes aleatorios tienen fronteras *reflejantes*: cuando un caminante se encuentra en una de las fronteras del hábitat e intenta dar un paso fuera del hábitat, se queda en el sitio frontera donde está actualmente; ver la figura 3.2.

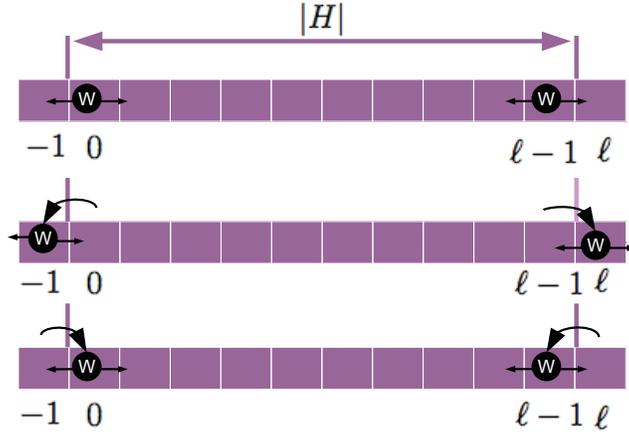


Figura 3.2: Funcionamiento de las fronteras reflejantes: si un caminante intenta salirse de su hábitat, se queda en el sitio donde está.

3.1.2. Modelo en dos dimensiones

En dos dimensiones, el modelo consiste en dos caminantes aleatorios que viven en sus respectivos hábitats H_1, H_2 , cada uno de tamaño $\ell \times \ell$ con fronteras reflejantes, en una red bidimensional. Los hábitats se traslapan en una región R , que es un rectángulo de dimensiones $m_1 \times m_2$. Las posiciones de los caminantes son $\vec{W}_1(t) \in \mathbb{Z}^2$ y $\vec{W}_2(t) \in \mathbb{Z}^2$; ver la figura 3.3.

3.2. Tiempos de primer encuentro

El *tiempo de primer encuentro*, T , es la variable aleatoria que denota el número de pasos que les toma a los caminantes llegar a tener la misma posición por primera vez. Más precisamente, un encuentro corresponde a un tiempo t tal que las posiciones de los dos caminantes coinciden: $W_1(t) = W_2(t)$ en una dimensión, y $\vec{W}_1(t) = \vec{W}_2(t)$ en dos

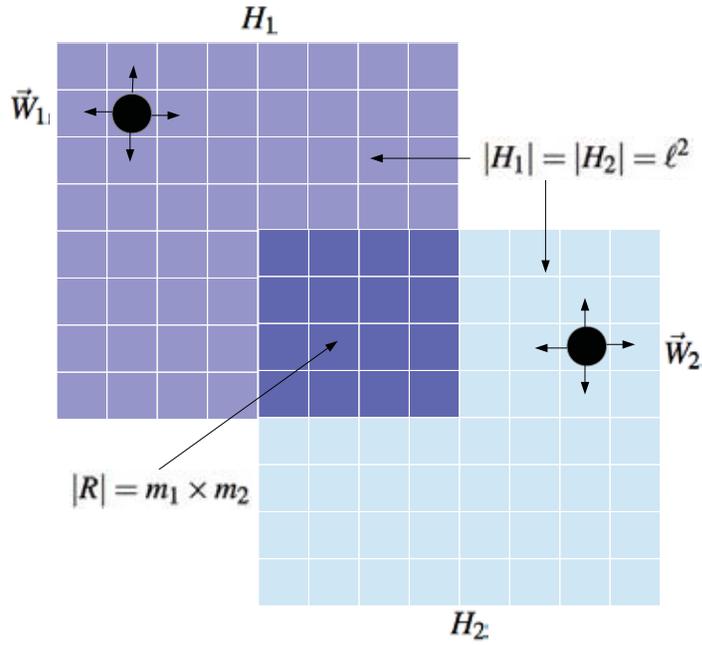


Figura 3.3: Modelo en dos dimensiones: dos caminantes aleatorios, $\vec{W}_1(t)$ y $\vec{W}_2(t)$, cada uno en un hábitat H de área ℓ^2 con condiciones reflejantes en las fronteras. Los hábitats se traslapan en un rectángulo R de área $m_1 \times m_2$.

dimensiones. Por lo tanto, en una dimensión podemos definir T como

$$(3.1) \quad T := \text{mín}\{t \in \mathbb{N} : W_1(t) = W_2(t)\},$$

y de manera similar en dos dimensiones.

3.3. Método de Monte Carlo

En el presente trabajo, el método de Monte Carlo se utiliza para entender y comparar con el método de enumeración exacta el comportamiento de los tiempos de encuentro de dos caminantes aleatorios confinados.

El método de Monte Carlo consiste en simular el sistema de dos caminantes aleatorios moviéndose en la computadora, y dejar correr el programa hasta que los dos caminantes se encuentren en el mismo sitio. Este procedimiento se repite un gran número de veces, con la finalidad de obtener las propiedades estadísticas del tiempo de primer encuentro, T .

3.3.1. Algoritmo del método de Monte Carlo

A continuación se presenta el algoritmo del método de Monte Carlo, para calcular el tiempo de encuentro de dos caminantes en 1D en una realización:

1. Se tienen hábitats de tamaño ℓ para cada caminante.
2. Se mantiene fija la región de traslape entre los hábitats, de tamaño m , que puede tomar valores desde 1 hasta ℓ .
3. Se coloca a cada caminante uniformemente al azar en su respectivo hábitat. Si las posiciones iniciales $W_1(t)$ y $W_2(t)$ son iguales, se vuelven a colocar en otra posición, hasta que éstas sean diferentes.
4. En cada paso de tiempo, sólo un caminante se mueve; se elige cuál con probabilidad $\frac{1}{2}$.
5. Los caminantes dan pasos a la izquierda o derecha con probabilidad $\frac{1}{2}$.
6. Los territorios tienen fronteras reflejantes, es decir, si un caminante intenta salirse de su territorio, se queda en el mismo sitio.
7. Si los caminantes se encuentran en el mismo sitio, se guarda el tiempo actual y se vuelve a comenzar; si no, se continúa desde el paso 4.

En 2D, el tamaño del hábitat es $\ell \times \ell$ para cada caminante; la región de traslape tiene tamaño $m_1 \times m_2$ y puede tener tamaño desde 1 hasta ℓ^2 ; si las posiciones iniciales $\vec{W}_1(t)$ y $\vec{W}_2(t)$ son iguales, se toman otras hasta que sean diferentes. Sólo un caminante se mueve a la vez y los movimientos posibles son arriba, abajo, izquierda o derecha con probabilidad $\frac{1}{4}$. Los demás pasos son análogos al caso unidimensional.

Los resultados obtenidos con Monte Carlo se mostrarán posteriormente al compararlos con los obtenidos con enumeración exacta.

Capítulo 4

Enumeración exacta para tiempos de encuentro de dos caminantes aleatorios

En este capítulo, se presenta la contribución central de esta tesis: introducimos una extensión del método de enumeración exacta para calcular el tiempo de encuentro de dos caminantes aleatorios. Esto se basa en la versión del método propuesta por O. Bénichou et al. [10] para un solo caminante con un sitio absorbente, el cual se presentó en la sección 2.4. Nos permite encontrar de manera numéricamente exacta la distribución de probabilidad completa, y por lo tanto el promedio y la varianza, del tiempo de primer encuentro de dos caminantes aleatorios.

4.1. Mapeo de dos caminantes a un caminante en el doble de dimensiones

La idea principal es la siguiente. Para extender la propuesta de Bénichou et al., y así poder aplicar enumeración exacta para calcular tiempos de encuentro de dos cami-

nantes aleatorios, llevamos a cabo un *mapeo*, convirtiendo el sistema de dos caminantes aleatorios en un solo caminante aleatorio moviéndose en un espacio del doble de la dimensión. Este mapeo se ha utilizado anteriormente, por ejemplo en [5].

4.1.1. Mapeo de dos caminantes en 1D a un caminante en 2D

Consideremos primero el caso de dos caminantes aleatorios en una dimensión, con coordenadas $W_1(t)$ y $W_2(t)$, respectivamente. Definamos el vector $\vec{W}(t) = (W_1(t), W_2(t) - \Delta)$, donde $\Delta = \ell - m$ es el desplazamiento del hábitat H_2 respecto al hábitat H_1 . (Este recorrimiento sólo es por conveniencia al momento de describir las coordenadas.) Al moverse el caminante 1 en su hábitat unidimensional, cambia la coordenada $W_1(t)$ del espacio en 2D; y al cambiar de posición el caminante 2 en su hábitat unidimensional, cambia la coordenada $W_2(t)$ del espacio 2D. Por lo tanto, el vector $\vec{W}(t)$ se puede considerar como un caminante aleatorio en dos dimensiones.

Para el caminante aleatorio en 2D, la ecuación maestra para la evolución de la distribución de probabilidad del caminante, se reduce a

$$(4.1) \quad P_{ij}(t+1) = \frac{1}{4}[P_{i-1,j}(t) + P_{i+1,j}(t) + P_{i,j-1}(t) + P_{i,j+1}(t)].$$

Aquí, $P_{ij}(t)$ es la probabilidad de que el caminante 2D se encuentre en el sitio (i, j) al tiempo t .

4.1.2. Encuentros y sitios meta

Los caminantes aleatorios se encuentran en el tiempo t si $W_1(t) = W_2(t)$. Estos encuentros sólo pueden tener lugar cuando los dos caminantes están adentro de la región de traslape, de longitud m . Para $m = 1$, los caminantes se pueden encontrar sólo en un sitio: este sitio es el último del hábitat H_1 y el primero del hábitat H_2 ; en el espacio

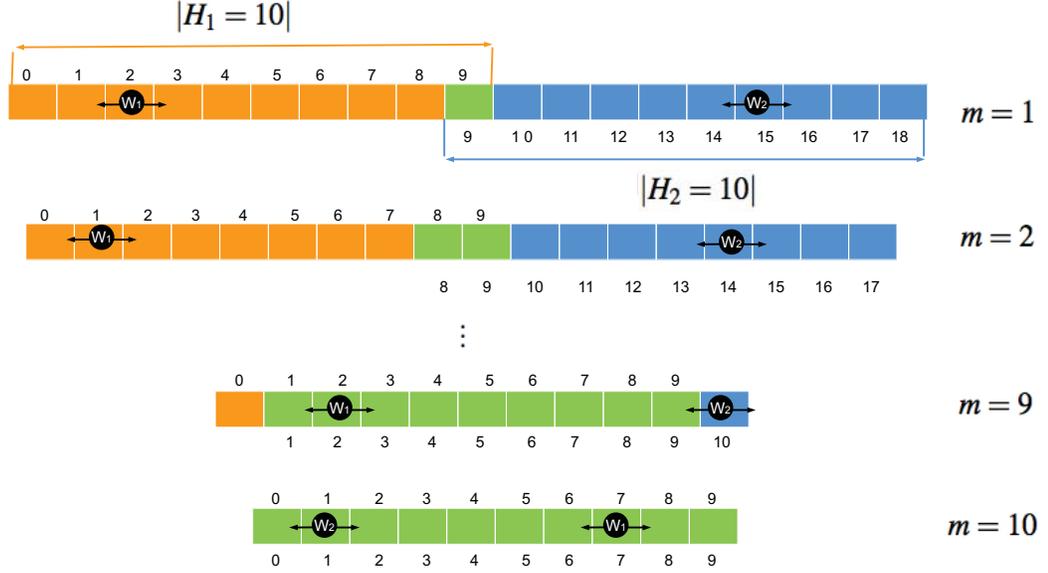


Figura 4.1: Dos caminantes en una dimensi3n, para diferentes tama1os de traslape m , con longitud $\ell = 10$ de cada h1bitat.

2D, corresponde entonces a la posici3n $\vec{M} = (\ell - 1, 0)$. Para $m = 2$, se pueden encontrar en los dos 1ltimos sitios de H_1 y en los dos primeros de H_2 , es decir, en $\vec{M}_1 = (\ell - 2, 0)$ y $\vec{M}_2 = (\ell - 1, 1)$ en 2D. Para $m = \ell$ los dos h1bitats corresponden sitio a sitio sin desplazamiento, as1 que las coordenadas de los puntos donde se pueden encontrar son $\mathbb{M} = \{(0, 0), (1, 1), \dots, (\ell - 1, \ell - 1)\} = \{(i, i) : i = 0, \dots, \ell - 1\}$. Denotaremos en general el conjunto de sitios meta por $\mathbb{M} = \{\vec{M}_i\}$.

Un encuentro de los dos caminantes corresponde, entonces, a la llegada del caminante en 2D a un sitio absorbente, $\vec{W}(t) = \vec{M}_i$ para alguna i , es decir, $W(t) \in \mathbb{M}$. As1, hemos mapeado el problema de encuentro de dos caminantes, al problema de primer paso de un solo caminante a un *conjunto* de sitios meta.

La figura 4.2 muestra el sistema mapeado en dos dimensiones, y varios conjuntos de sitios meta para distintos tama1os m de la regi3n de traslape.

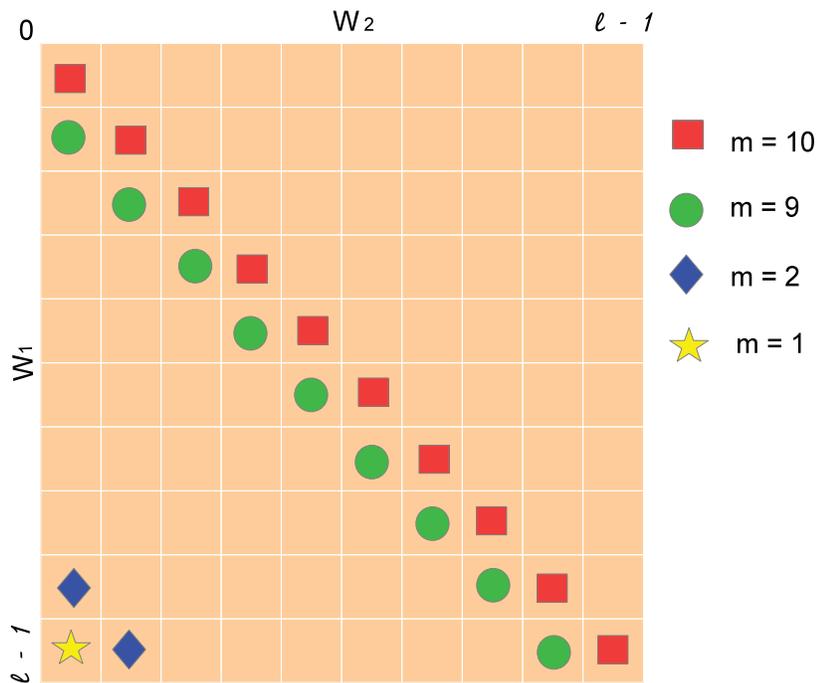


Figura 4.2: El espacio confinado del caminante en dos dimensiones, y los conjuntos de sitios meta para distintos tamaños m del traslape de los dos hábitats.

4.1.3. Mapeo de dos caminantes en 2D a un caminante en 4D

De igual forma, podemos mapear el sistema de dos caminantes moviéndose en 2D a un solo caminante en 4D. Al moverse el caminante 1 en su hábitat bidimensional, cambian sus coordenadas $\vec{W}_1(t) := (W_1(t), W_2(t))$; y al cambiar de posición el caminante 2 en su hábitat bidimensional, cambian sus coordenadas $\vec{W}_2(t) := (W_3(t), W_4(t))$. Así, podemos ver al sistema de dos caminantes como un solo caminante en cuatro dimensiones con coordenadas $\vec{W}(t) := (\vec{W}_1(t), \vec{W}_2(t)) = (W_1(t), W_2(t), W_3(t), W_4(t))$, cuando en realidad, son dos caminantes moviéndose cada uno en su espacio bidimensional.

En este caso, la ecuación maestra es

$$(4.2) \quad P_{ijkl}(t+1) = \frac{1}{8} [P_{i-1,j,k,l}(t) + P_{i+1,j,k,l}(t) + P_{i,j-1,k,l}(t) + P_{i,j+1,k,l}(t) + P_{i,j,k-1,l}(t) + P_{i,j,k+1,l}(t) + P_{i,j,k,l-1}(t) + P_{i,j,k,l+1}(t)],$$

en donde $P_{ijkl}(t)$ es la probabilidad de que el caminante en 4D esté en el lugar $(i, j, k, l) \in \mathbb{Z}_+^4$. En 4D tiene ocho direcciones posibles a donde moverse.

4.2. Planteamiento del método de enumeración exacta para encuentros de dos caminantes aleatorios

Habiendo llevado a cabo el mapeo propuesto en la sección anterior, el problema del encuentro de dos caminantes se reduce al problema de primer paso de un solo caminante a un *conjunto* de sitios meta, \mathbb{M} .

Por lo tanto, el método de Bénichou et al. se puede aplicar, al generalizarlo para tomar en cuenta la posibilidad de contar con más de un sitio meta. Se evoluciona la distribución de probabilidad mediante la ecuación maestra correspondiente. En el tiempo t , la probabilidad de absorción en alguno de los sitios meta \vec{M}_i , equivalente a la probabilidad de encuentro, es $\varphi(t) := \sum_i P(\vec{M}_i, t)$. Luego se asigna a 0 todas las $P(\vec{M}_i, t)$.

4.3. Algoritmo del método de enumeración exacta

El algoritmo para encontrar la distribución de probabilidad de los tiempos de encuentro de dos caminantes en 1D queda como sigue, trabajando en el espacio 2D correspondiente.

1. A cada sitio se le asigna la probabilidad inicial; ver la sección 4.4.1.
2. Se evoluciona la probabilidad según la ecuación maestra correspondiente a la dimensión en que se esté trabajando, tomando en cuenta las condiciones de frontera; ver la sección 4.4.2.
3. Las probabilidades que caen en los sitios absorbentes se suman; el resultado se guarda.
4. Se determina el tiempo al cual dejar de evolucionar el sistema; ver la sección 4.6.
5. Si no ha terminado, se continúa desde el paso 2.

4.4. Implementación del método de enumeración exacta

En esta sección, se discutirán algunos detalles de la implementación computacional del método de enumeración exacta; el código se escribió en C++.

4.4.1. Condiciones iniciales

Escogemos condiciones iniciales uniformes en el espacio disponible: al tiempo $t = 0$, cada caminante se coloca uniformemente al azar en su respectivo hábitat en \mathbb{Z} o en \mathbb{Z}^2 . Sin embargo, excluimos la posibilidad de que los dos caminantes se encuentren en el mismo sitio al tiempo inicial.

Por lo tanto, en el sistema mapeado, ponemos probabilidades iniciales $P_{ij}(t = 0) = \frac{1}{\ell^2 - m}$ para todas las $(i, j) \notin \mathbb{M}$ en 2D, y $P_{ijkl}(t = 0) = \frac{1}{\ell^4 - m_1 m_2}$ para $(i, j, k, l) \notin \mathbb{M}$ en 4D. Se muestra un ejemplo en la figura 4.3.

$\frac{1}{15}$	$\frac{1}{15}$	$\frac{1}{15}$	$\frac{1}{15}$
$\frac{1}{15}$	$\frac{1}{15}$	$\frac{1}{15}$	$\frac{1}{15}$
$\frac{1}{15}$	$\frac{1}{15}$	$\frac{1}{15}$	$\frac{1}{15}$
0	$\frac{1}{15}$	$\frac{1}{15}$	$\frac{1}{15}$

Figura 4.3: Distribución inicial de probabilidad para $m = 1$ y $\ell = 4$ para el sistema 2D.

4.4.2. Fronteras extendidas

La mayor complicación al implementar el método de enumeración exacta es el reflejar las probabilidades en las fronteras, es decir, la probabilidad que intenta salirse del sistema y que por condiciones de fronteras reflejantes tiene que regresar a él. Para resolver este problema de una manera computacionalmente ágil, introducimos una *frontera extendida* (también conocido como sitios fantasma), que consiste en agregar sitios adyacentes a las fronteras verdaderas del sistema, como se muestra en la figura 4.4. Estos sitios adicionales permiten evolucionar de manera convencional la probabilidad. Al final de cada paso, la probabilidad que llegó a estos sitios extendidos se regresa al sitio real correspondiente. Finalmente, se hacen ceros las probabilidades en los sitios de la frontera extendida.

A continuación, mostramos un extracto del (pseudo-)código para copiar las fronteras extendidas para cada lado del sistema en 2D. Se debe tomar en cuenta que las coordenadas del sistema inicia en 0 y termina en $\ell - 1$.

Para ir barriendo cada sitio de la frontera extendida, necesitamos un bucle. Cada sitio inicialmente contiene cero; al evolucionarse la probabilidad y llegar a los sitios ex-

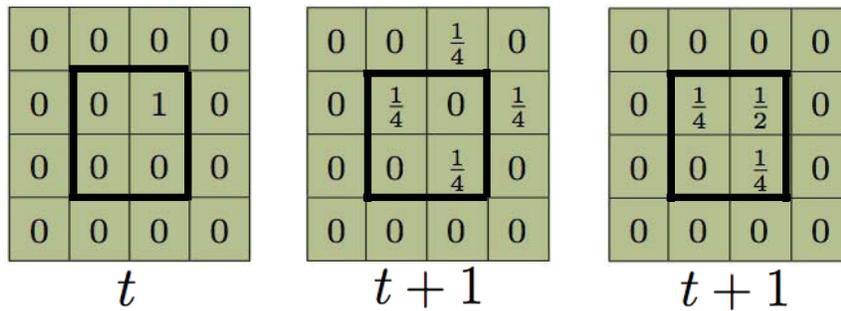


Figura 4.4: Evolución de la probabilidad con fronteras extendidas. La línea gruesa representa la frontera real del sistema; las fronteras extendidas son los sitios adyacentes a ella.

tendidos, se suman al sitio correspondiente de la frontera real, es decir al sitio de donde provenían. Al haberse copiado la frontera extendida a su correspondiente frontera real se procede a hacer cero la frontera extendida.

```
for (j = 1; j < L-1; j++) {
```

arriba

```
p_nuevo[1][j] += p_nuevo[0][j];
p_nuevo[0][j] = 0.0;
```

derecha

```
p_nuevo[j][L-2] += p_nuevo[j][L-1];
p_nuevo[j][L-1] = 0.0;
```

```
}
```

De manera análoga se realiza este procedimiento para las otras caras.

El sistema en dos dimensiones se mapea a cuatro dimensiones. Para entender el funcionamiento de las fronteras en 4D, lo explicaremos en 3D, ya que en este caso se puede visualizar. Un cubo tiene 6 caras y necesitamos un cubo un sitio más grande en cada dirección, que constituye nuestra frontera extendida. Para recuperar la probabilidad que llegó a la frontera extendida, recorreremos cada una de las caras y sumamos el contenido del sitio extendido al sitio de la frontera real que le corresponde; luego hacemos 0 la frontera extendida. Por ejemplo, como se muestra en la figura 4.5, en la cara de arriba se mantiene fija k en $(\ell - 1)$ y se recorren i y j de 1 hasta $\ell - 1$. Se describe el procedimiento para unas caras representativas a continuación. (Nótese que L en el código corresponde a ℓ .)

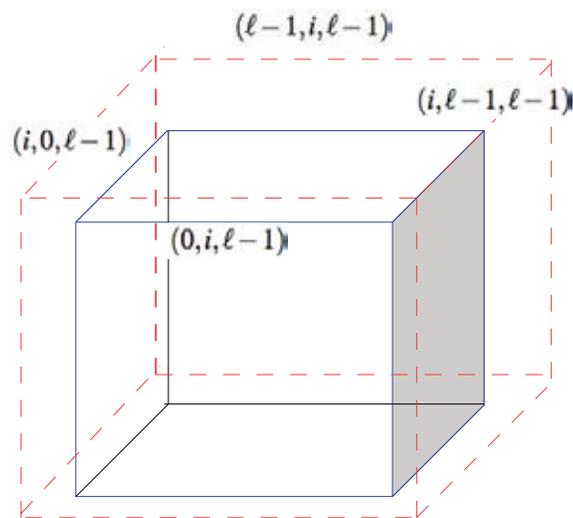


Figura 4.5: Fronteras extendidas el sistema en 3D.

```
for (i = 1; i < L-1; i++)  
  for (j = 1; j < L-1; j++)  
    for (k = 1; k < L-1; k++) {
```

arriba

```
p_nuevo[i][j][L-1] += p_nuevo[i][j][L];  
p_nuevo[i][j][L] = 0.0;
```

abajo

```
p_nuevo[i][j][1] += p_nuevo[i][j][0];  
p_nuevo[i][j][0] = 0.0;
```

```
}
```

De manera análoga se realiza este procedimiento para las otras caras.

Para el caso en cuatro dimensiones, las fronteras extendidas quedan de la siguiente manera:

```
for (i = 1; i < L-1; i++)  
  for (j = 1; j < L-1; j++)  
    for (k = 1; k < L-1; k++)  
      for (l = 1; l < L-1; l++) {
```

cara 1

```
p_nuevo[1][j][k][1] += p_nuevo[0][j][k][1];  
p_nuevo[0][j][k][1] = 0.0;
```

cara 2, opuesta a cara 1

```

    p_nuevo[L-2][j][k][1] += p_nuevo[L-1][j][k][1];
    p_nuevo[L-1][j][k][1] = 0.0;
}

```

De manera análoga se realiza este procedimiento para las otras caras.

4.5. Validación de enumeración exacta

Para validar la implementación del método de enumeración exacta, comparamos la salida del método con los datos obtenidos al calcular histogramas de los resultados para los tiempos de encuentro obtenidos con Monte Carlo. Un ejemplo se muestra en la figura 4.6. Vemos que los resultados de los dos métodos coinciden.

La figura muestra que el método de Monte Carlo provee resultados que son bastante ruidosos, mientras que en enumeración exacta la distribución de probabilidad se obtiene de manera mucho más nítida. Ésta es una prueba de que el método de enumeración exacta está reproduciendo los mismos resultados que el método de Monte Carlo, y confirma que produce resultados de mucho mayor calidad para la distribución de probabilidad de los tiempos de encuentro.

Además, podemos ver que la distribución tiene un comportamiento asintóticamente exponencial, ya que en escala semi-logarítmica la cola se ve recta.

4.6. Cálculo del valor esperado y la condición de terminación del algoritmo

En esta sección, discutiremos el cálculo del valor esperado de una variable aleatoria a partir de su distribución de probabilidad. Dado que esto puede involucrar una suma

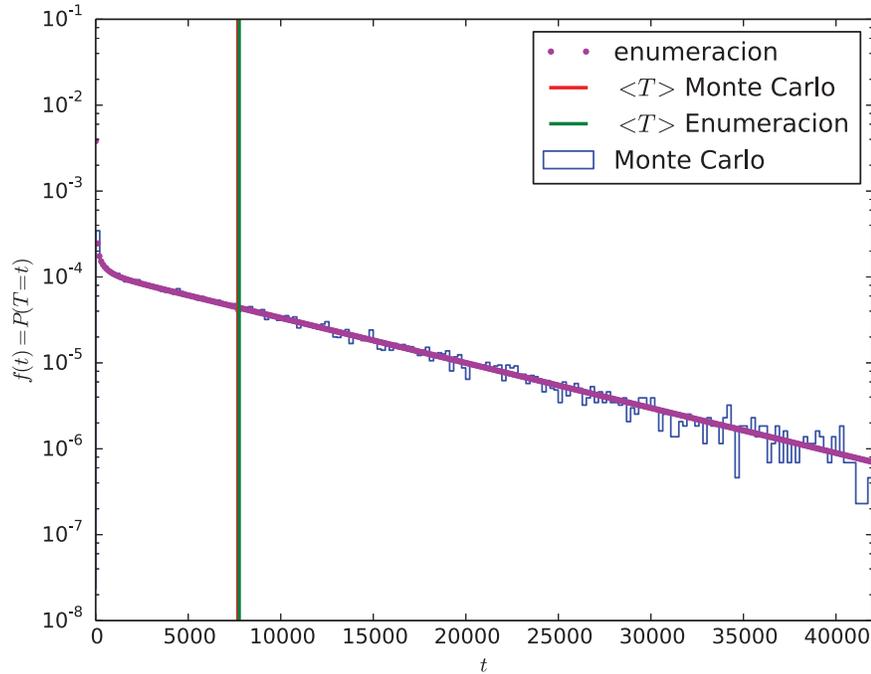


Figura 4.6: Distribución de probabilidad del tiempo de encuentro T para $m = 10$ y $\ell = 50$ en escala semi-logarítmica. Se compara un histograma de los tiempos obtenidos con el método de Monte Carlo con el cálculo a través del método de enumeración exacta.

infinita, es necesario contar con una manera de estimar el promedio a partir de una parte *finita* de la distribución. Esto se hará siguiendo a Benichou et al. [10, Apéndice E].

El valor esperado de una variable aleatoria discreta T está dado por

$$(4.3) \quad \langle T \rangle = \sum_{t=1}^{\infty} t \cdot P(T = t),$$

Dado que no nos es posible obtener tiempos de encuentro arbitrariamente grandes en la computadora, buscamos una manera alternativa para realizar la suma infinita.

En la figura 4.6, se muestra la distribución de probabilidad $\varphi(t)$ para los tiempos de encuentro, obtenido con enumeración exacta, y con Monte Carlo para una comparación.

Las probabilidades disminuyen en el tiempo. De la figura, vemos que la cola de la distribución es una línea recta vista en escala semi-logarítmica. Por lo tanto, podemos asignar (de una manera por determinarse abajo) un t_{\max} tal que

$$(4.4) \quad \log \varphi(t) = -\alpha t + b \quad \text{para } t > t_{\max}.$$

Despejando $\varphi(t)$, obtenemos

$$(4.5) \quad \varphi(t) = C \cdot e^{-\alpha(t-t_{\max})} \quad \text{para } t > t_{\max},$$

así que la distribución tiene un comportamiento asintóticamente exponencial.

Ahora separamos la suma del valor esperado en dos partes:

$$(4.6) \quad \langle T \rangle = \sum_{t=1}^{t_{\max}-1} t \cdot P(T=t) + \sum_{t=t_{\max}}^{\infty} t \cdot C e^{-\alpha(t-t_{\max})}.$$

Para saber cuánto vale la constante C , usamos

$$(4.7) \quad P(t=t_{\max}) = C \cdot e^{-\alpha(t_{\max}-t_{\max})} = C.$$

Por lo tanto, la ecuación (4.6) queda de la siguiente manera:

$$(4.8) \quad \langle T \rangle = \sum_{t=1}^{t_{\max}-1} t \cdot P(T=t) + P(t_{\max}) \sum_{t=t_{\max}}^{\infty} t \cdot e^{-\alpha(t-t_{\max})}.$$

Pero ahora, la suma infinita que queda en el segundo término se puede evaluar en forma cerrada, ya que está relacionada con una serie geométrica, como sigue.

Recordemos que una serie geométrica tiene la forma

$$(4.9) \quad 1 + A + A^2 + A^3 + A^4 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} A^n = \frac{1}{1-A}.$$

Nosotros tenemos una expresión de la forma

$$(4.10) \quad S := A \cdot 1 + A^2 \cdot 2 + A^3 \cdot 3 + A^4 \cdot 4 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} n \cdot A^n,$$

con $A = e^{-\alpha}$. Podemos reescribir esta expresión como sigue:

$$(4.11) \quad S = \left(\sum_{n=0}^{\infty} n \cdot A^{n-1} \right) A.$$

El término entre paréntesis tiene la forma de una derivada; metiendo la suma a la derivada, obtenemos

$$(4.12) \quad S = A \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d}{dA} (A^n) = A \frac{d}{dA} \left(\sum_{n=0}^{\infty} A^n \right).$$

El término dentro de las paréntesis es la serie geométrica; por lo tanto, tenemos

$$(4.13) \quad S = A \cdot \frac{d}{dA} \left[\frac{1}{1-A} \right] = \frac{A}{(1-A)^2}.$$

Estas sumas van de cero a infinito, pero nosotros tenemos en (4.8) una suma de t_{\max} a infinito, porque sólo en esa parte es exponencial la distribución de probabilidad. Por lo tanto, necesitamos hacer un cambio de variable. Por comodidad, llamaremos n_0 a t_{\max} y n a t . Cambiemos de variable a $m := n - n_0$.

Sustituyendo en la suma (4.8), obtenemos

$$(4.14) \quad \sum_{n=n_0}^{\infty} n \cdot P(n) = P(n_0) \sum_{m=0}^{\infty} (m + n_0) e^{-\alpha m}.$$

Desarrollando, tenemos

$$(4.15) \quad = P(n_0) \sum_{m=0}^{\infty} m \cdot e^{-\alpha m} + n_0 \cdot P(n_0) \sum_{m=0}^{\infty} e^{-\alpha m}.$$

De las ecuaciones (4.9) y (4.13) y sustituyendo A , obtenemos

$$(4.16) \quad = \frac{P(n_0) \cdot e^{-\alpha}}{(1 - e^{-\alpha})^2} + \frac{P(n_0) \cdot n_0}{1 - e^{-\alpha}},$$

con lo cual encontramos el valor esperado de la variable aleatoria:

$$(4.17) \quad \langle T \rangle = \sum_{t=0}^{\infty} t \cdot P(T = t) = \sum_{t=1}^{t_{\max}-1} t \cdot P(T = t) + \frac{P(t_{\max})e^{-\alpha}}{(1 - e^{-\alpha})^2} + \frac{P(t_{\max})t_{\max}}{1 - e^{-\alpha}}.$$

Los dos últimos términos corresponden a $\sum_{t=t_{\max}}^{\infty} P(t_{\max})e^{-\alpha(t-t_{\max})}$.

Para calcular α , estimamos la pendiente de la cola exponencial de la distribución; ver la figura 4.6. Como podemos ver en la figura, la pendiente es negativa, y el eje y está en escala logarítmica. Así que tenemos

$$(4.18) \quad -\alpha = \frac{\ln P(t_{\max}) - \ln P(t_i)}{t_{\max} - t_i},$$

donde t_i es el tiempo inicial usado para calcular la pendiente. Siguiendo a Benichou et al. [10], tomamos $t_i := t_{\max} - 10$, o bien, $t_{\max} - t_i = 10$. Por lo tanto, estimamos α usando

$$(4.19) \quad \alpha = \frac{1}{10} \ln \frac{P(t_{\max} - 10)}{P(t_{\max})}.$$

Para decidir en qué momento podemos parar el algoritmo, notamos que no tiene caso seguir calculando las probabilidades una vez que estemos en la cola exponencial. Para estimar un valor adecuado de t_{\max} para el cual esto pasa, cada mil pasos de tiempo calculamos el valor esperado y lo comparamos con el valor anterior. Si el promedio al tiempo t difiere en menos de 0.1 % del valor esperado al tiempo $t + 1000$, esto quiere decir que ya nos encontramos en la región exponencial; de lo contrario, seguimos calculando las probabilidades.

4.7. Varianza

La varianza de una variable aleatoria discreta está dada por

$$(4.20) \quad \text{Var}(T) = \langle T^2 \rangle - \langle T \rangle^2 = \sum_{t=1}^{\infty} t^2 \cdot P(T=t) - \langle T \rangle^2.$$

Necesitamos calcular el término $\langle T^2 \rangle$. Para el caso de los tiempos de encuentro, una vez más no podemos realizar de manera exacta la suma hasta infinito, y de nuevo separamos la suma en dos partes:

$$(4.21) \quad \langle T^2 \rangle = \sum_{t=1}^{t_{\max}-1} t^2 \cdot P(T=t) + C \sum_{t=t_{\max}}^{\infty} t^2 \cdot e^{-\alpha(t-t_{\max})}.$$

Ahora necesitamos una suma de la forma

$$(4.22) \quad 1 \cdot A + 4 \cdot A^2 + 9 \cdot A^3 + \dots = \sum_n n^2 A^n.$$

Buscamos una manera alternativa de escribir este término sin utilizar suma. Utilizamos el siguiente operador:

$$(4.23) \quad A \frac{d}{dA} \left(A \frac{d}{dA} (\cdot) \right) = \left(A \frac{d}{dA} \right)^2.$$

Aplicando el operador, tenemos

$$(4.24) \quad \begin{aligned} \sum_n \left(A \frac{d}{dA} \right)^2 A^n &= \sum_n \left(A \frac{d}{dA} \right) \left[A \frac{d}{dA} (A^n) \right] = \sum_n A \frac{d}{dA} (A \cdot nA^{n-1}) \\ &= \sum_n \left(A \frac{d}{dA} \right) (nA^n) = \sum_n An \cdot nA^{n-1} = \sum_n n^2 A^n. \end{aligned}$$

Vemos que al aplicar el operador a A^n recuperamos (4.22), por lo cual podemos meter la

suma y sustituir la serie geométrica:

$$(4.25) \quad \left(A \frac{d}{dA}\right)^2 \sum_n A^n = \left(A \frac{d}{dA}\right)^2 \left(\frac{1}{1-A}\right).$$

Realizando las derivadas, tenemos

$$(4.26) \quad = \left(A \frac{d}{dA}\right) \left[\frac{A}{(1-A)^2} \right] = \frac{A}{(1-A)^2} + \frac{2A^2}{(1-A)^3}.$$

Finalmente, obtenemos

$$(4.27) \quad \sum_n A^n n^2 = \frac{A}{(1-A)^2} + \frac{2A^2}{(1-A)^3}.$$

Llevamos a cabo el mismo cambio de variables que en la sección anterior para calcular la suma en (4.21). Obtenemos

$$(4.28) \quad \begin{aligned} \sum_{n=n_0}^{\infty} n^2 P(n) &= P(n_0) \sum_{m=0}^{\infty} (m+n_0)^2 e^{-\alpha m} \\ &= P(n_0) \sum_{m=0}^{\infty} (m^2 + 2mn_0 + n_0^2) e^{-\alpha m}. \end{aligned}$$

Desarrollando, tenemos

$$(4.29) \quad = P(n_0) \sum_{m=0}^{\infty} m^2 e^{-\alpha m} + 2n_0 P(n_0) \sum_{m=0}^{\infty} m e^{-\alpha m} + n_0^2 P(n_0) \sum_{m=0}^{\infty} e^{-\alpha m}.$$

Usando (4.9) , (4.13) y (4.27) en la ecuación (4.29), tenemos

$$(4.30) \quad \langle T^2 \rangle = \sum_{t=1}^{t_{\max}-1} t^2 \cdot P(T=t) + P(t_{\max}) \left\{ \frac{A}{(1-A)^2} + \frac{2A^2}{(1-A)^3} \right\} + \frac{2t_{\max} P(t_{\max}) A}{(1-A)^2} + \frac{t_{\max}^2 P(t_{\max})}{1-A}.$$

Finalmente, obtenemos

$$\langle T^2 \rangle = \sum_{t=1}^{t_{\max}-1} t^2 \cdot P(T=t) + P(t_{\max}) \left\{ \frac{e^{-\alpha}}{(1-e^{-\alpha})^2} + \frac{2e^{-2\alpha}}{(1-e^{-\alpha})^3} + \frac{2t_{\max}e^{-\alpha}}{(1-e^{-\alpha})^2} + \frac{t_{\max}^2}{1-e^{-\alpha}} \right\}.$$

Capítulo 5

Resultados para tiempos de primer encuentro

En este capítulo se muestran algunos resultados obtenidos para los tiempos de encuentro de dos caminantes confinados en una y dos dimensiones. Se calculan las distribuciones de probabilidad completas, el tiempo de encuentro promedio y la varianza.

Cabe mencionar que para una validación adicional del método de enumeración exacta, varios de los resultados para los tiempos promedio presentados en este capítulo corresponden con aquéllos calculados en [6] con un método matricial, el cual también es numéricamente exacto.

5.1. Tiempos de encuentro para dos caminantes en una dimensión

Para obtener los resultados con el método de Monte Carlo, variamos el tamaño ℓ del hábitat desde 10 hasta 1000 en intervalos de 10 y el de la región de traslape. Para

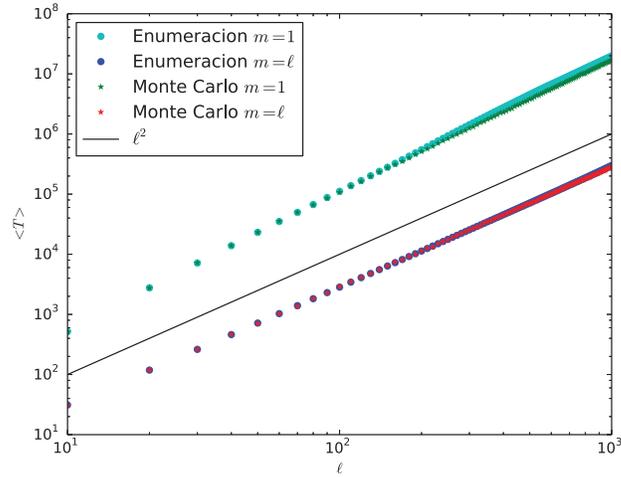


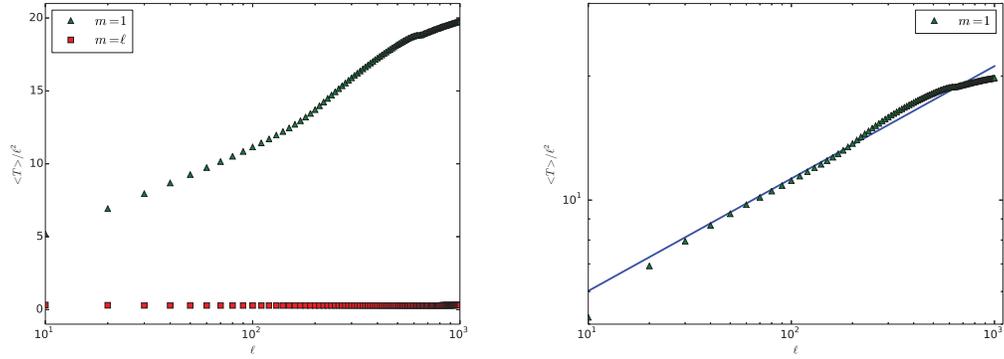
Figura 5.1: $\langle T \rangle$ vs ℓ , utilizando Monte Carlo y enumeración para $m = 1$ y $m = \ell$.

un tamaño del hábitat y traslape dado, se tomaron 10000 condiciones iniciales uniformemente al azar, y para cada una se halló el tiempo de primer encuentro. Con estos datos se obtienen el promedio y la varianza.

Para el método de enumeración exacta, el tamaño del sistema mapeado se varía desde 10×10 hasta 1000×1000 en intervalos de 10. Para un tamaño del sistema y de sitios meta fijo, en cada corrida se obtiene la distribución de probabilidad completa de los tiempos de primer encuentro, y de ahí el promedio y la varianza.

Para poder apreciar mejor el comportamiento del valor esperado de los tiempos de encuentro promedio, nos enfocamos en los casos extremos: cuando la región de traslape sólo consta de un punto ($m = 1$) y el otro es cuando ambos caminantes cohabitan ($m = \ell$).

En la figura 5.1 se grafica el tiempo de encuentro promedio en función de ℓ en escala logarítmica, obtenidos con el método de Monte Carlo y con enumeración exacta. Observamos que efectivamente se obtienen las mismas curvas con ambos métodos, lo cual da evidencia a favor de que nuestra implementación del método de enumeración exacta es correcta.



(a) Escalamiento $\langle T \rangle / \ell^2$ vs ℓ para $m = 1$ y $m = \ell$. (b) Ajuste para $m = 1$ en escala log-log.

Figura 5.2: En a) para $m = \ell$ los datos son una constante. En b) se hace un ajuste en escala logarítmica para $m = 1$.

Vemos que el tiempo de encuentro promedio es mayor para $m = 1$ que para $m = \ell$, lo cual es de esperarse, ya que para $m = \ell$ la probabilidad que se escapa del sistema en cada paso es mayor, dado que se escapa por ℓ sitios, mientras que para $m = 1$ sólo se escapa por un sitio. También podemos ver que la curva para $m = \ell$ tiene un comportamiento $\langle T \rangle \sim \ell^2$.

Para verificar este comportamiento, la figura 5.2 muestra $\langle T \rangle / \ell^2$ en escala semi-logarítmica. Vemos que para el caso $m = \ell$ es prácticamente una constante, mientras que para $m = 1$ difiere considerablemente de un valor fijo.

Se realizaron ajustes de los datos para estimar el comportamiento asintótico de los mismos. Para $m = \ell$, se sabe que los tiempos promedio de encuentro se escalan como ℓ^2 [6]. Para $m = 1$, se espera un escalamiento $\ell^2 \log \ell$ [6].

En la figura 5.3 para $m = 1$ nos dio un ajuste de $\ell^{2.04} \log \ell$ (magenta) y un ajuste de $\ell^{2.3}$ (azul), y para $m = \ell$ el ajuste nos dio $\ell^{1.78} \log \ell$ (negro) y un ajuste de $0.3\ell^2$ (rojo).

En 5.4 se muestran las varianzas obtenidas con enumeración exacta y con Monte Carlo para $m = 1$ y para $m = \ell$, las cuales de nuevo concuerdan bien.

Para una distribución de tipo exponencial, se sabe que la desviación estándar, que

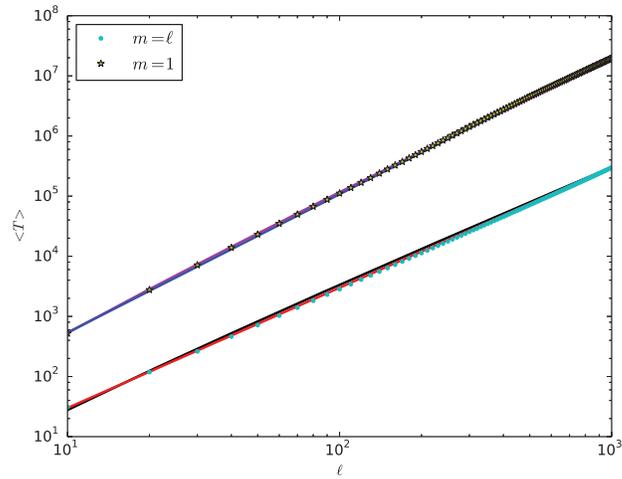


Figura 5.3: Ajuste de los tiempos de encuentro promedio, utilizando Monte Carlo y enumeración para $m = 1$ y $m = \ell$.

llamaremos σ , es igual al promedio, μ . Entonces la varianza $\text{Var}(T) = \sigma^2$, por lo cual para una distribución parecida a un exponencial, $\text{Var}(T) \sim \mu^2$. De nuestros resultados sabemos que $\mu \sim \ell^2$ para $m = \ell$; por lo tanto, $\text{Var}(T) \sim \ell^4$, lo cual es un indicio de que nuestra distribución es exponencial, lo cual comprobamos al realizar el ajuste que se muestra en la figura 5.5.

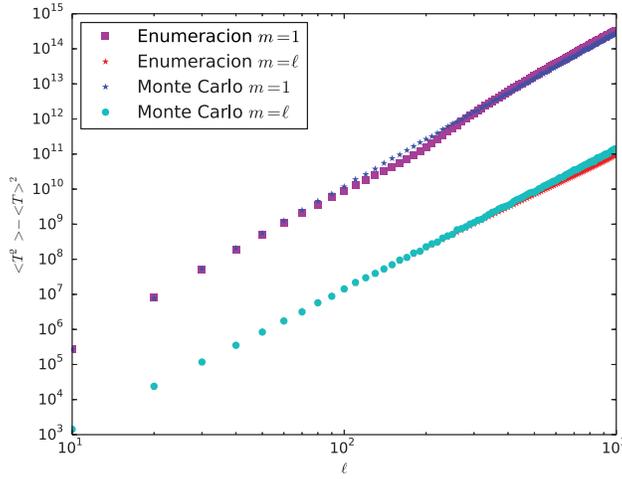


Figura 5.4: Varianza $\langle T^2 \rangle - \langle T \rangle^2$ vs ℓ .

5.2. Tiempos de primer encuentro de dos caminantes en dos dimensiones

Para obtener los resultados con el método de Monte Carlo, se tomaron distintos tamaños del hábitat desde $\ell = 10$ hasta $\ell = 200$ en intervalos de 10 y también se cambió el tamaño de la región de traslape. Se tomaron 10000 condiciones iniciales uniformemente al azar para cada tamaño del hábitat y traslape dado.

Para obtener los resultados con el método de enumeración exacta, el tamaño del sistema mapeado se fue variando desde $10 \times 10 \times 10 \times 10$ hasta $200 \times 200 \times 200 \times 200$ en intervalos de 10. Para un tamaño del sistema y de sitios meta fijo, en cada corrida se obtuvo la distribución de probabilidad completa de los tiempos de primer encuentro. Cabe mencionar que los sistemas más grandes requieren mucho tiempo de cómputo.

Para poder apreciar mejor el comportamiento de los tiempos de encuentro promedio, se tomaron los casos extremos: en donde sólo en un sitio se podían encontrar ($m_1 = 1$, $m_2 = 1$) y en donde los dos caminantes cohabitan ($m_1 = m_2 = \ell$), como podemos ver en

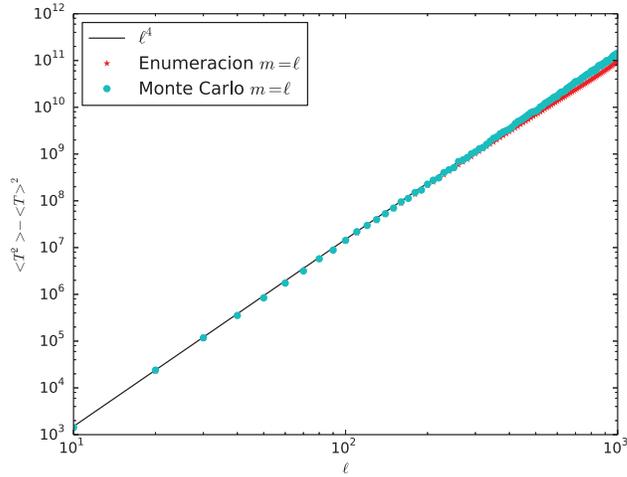


Figura 5.5: Ajuste para la varianza con $m = \ell$.

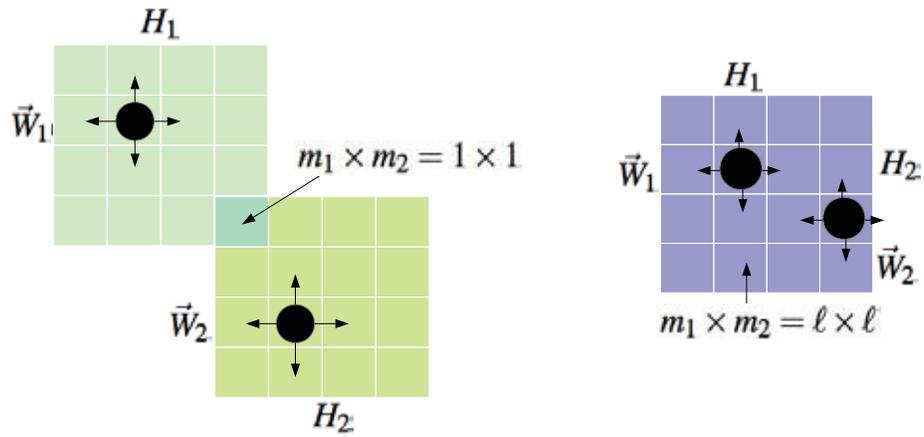
la figura 5.6.

En la figura 5.7 se muestra el tiempo de encuentro promedio en función de ℓ en escala logarítmica, con Monte Carlo y enumeración exacta. De nuevo, los resultados obtenidos con ambos métodos concuerdan.

El tiempo de encuentro promedio es mayor para $m_1 = m_2 = 1$ que para $m_1 = m_2 = \ell$, lo cual es de esperarse, ya que solamente se pueden encontrar los caminantes en un sitio. Además, el tamaño de los hábitats son más pequeños en comparación con el caso unidimensional, debido a que al manejar arreglos en cuatro dimensiones, el tiempo de cómputo es mayor.

Se realizó un ajuste para estos resultados, y se encontró que para $m_1 = m_2 = 1$ los tiempos promedio escalan como ℓ^4 y para $m_1 = m_2 = \ell$ como $\ell^{2.27}$.

Para verificar este comportamiento de $m_1 = m_2 = 1$, en la figura 5.8 se realizó un escalamiento, consideramos $\langle T \rangle / \ell^4$ en escala semi-logarítmica. Vemos que para el caso $m_1 = m_2 = 1$ es prácticamente una constante, mientras que para $m_1 = m_2 = \ell$ no es



(a) Traslape $m_1 = 1, m_2 = 1$

(b) Traslape $m_1 = \ell, m_2 = \ell$

Figura 5.6: Traslapes: $(m_1 = 1, m_2 = 1)$ y $(m_1 = \ell, m_2 = \ell)$.

constante.

A continuación presentaremos los resultados obtenidos con la varianza. Para los casos extremos en donde sólo se pueden encontrar en un sitio y en donde cohabitan los caminantes; se encontró que la varianza concuerda con los resultados obtenidos con Monte Carlo, como podemos en la figura 5.9

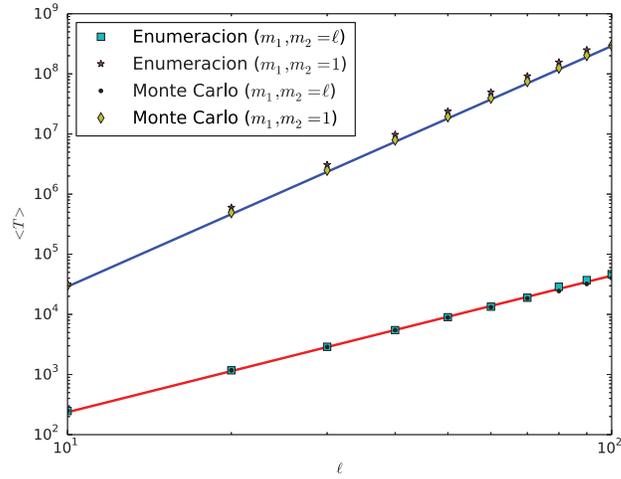


Figura 5.7: Ajuste para el tiempo de encuentro promedio en dos dimensiones con traslapes $(m_1 = 1, m_2 = 1)$ y $(m_1 = \ell, m_2 = \ell)$. En azul el escalamiento es ℓ^4 y en rojo $\ell^{2.27}$.

5.2.1. Resultados para diferentes valores del traslape cambiando el tamaño del hábitat

Ahora presentaremos los resultados de los tiempos de encuentro para algunos tipos diferentes de traslape al cambiar el tamaño del sistema. Los tres traslapes que utilizamos se muestran en la figura 5.10.

Los resultados que se obtuvieron se muestran en la figura 5.11. Podemos ver que los tiempos de encuentro promedio $\langle T \rangle$ aumentan dependiendo del tamaño de la región de traslape, como es de esperarse. El tiempo de encuentro promedio para $m_1 = 1, m_2 = \ell$ es mayor que el traslape $m_1 = \ell/2, m_2 = \ell/2$ y éste a su vez es mayor que el traslape $m_1 = \ell, m_2 = \ell - 1$.

En la figura 5.12 se muestran las varianzas para los traslapes $m_1 = 1, m_2 = \ell$, $(m_1 = \ell/2, m_2 = \ell/2)$, y $(m_1 = \ell, m_2 = \ell - 1)$. Para el menor traslape que corresponde a $m_1 = 1, m_2 = \ell$ la varianza es mayor, y para el traslape $(m_1 = \ell, m_2 = \ell - 1)$ la varianza es

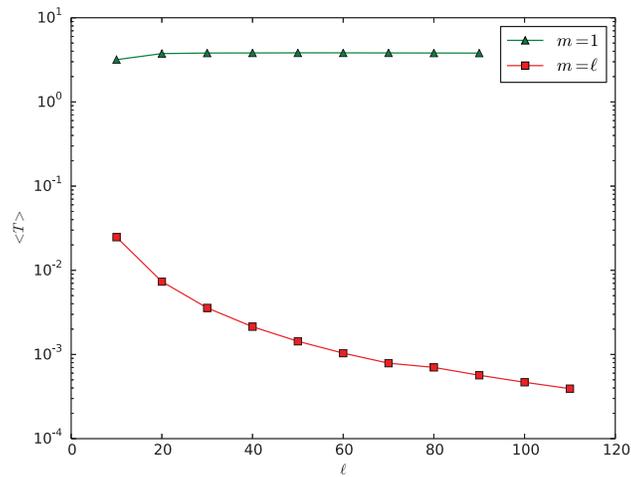


Figura 5.8: $\langle T \rangle / \ell^4$ vs ℓ . Para $m = 1$ los datos son una constante.

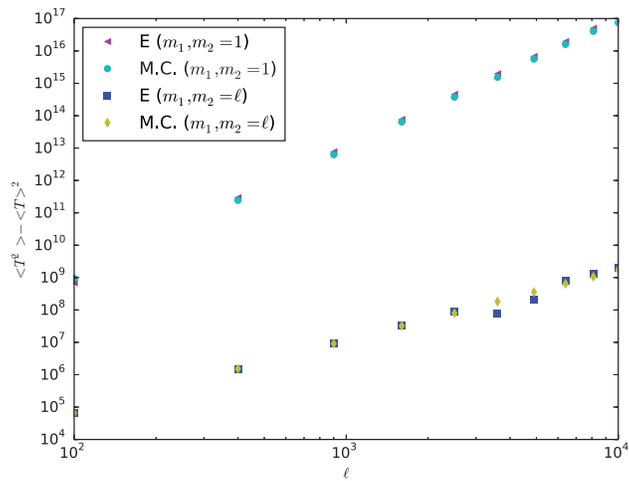
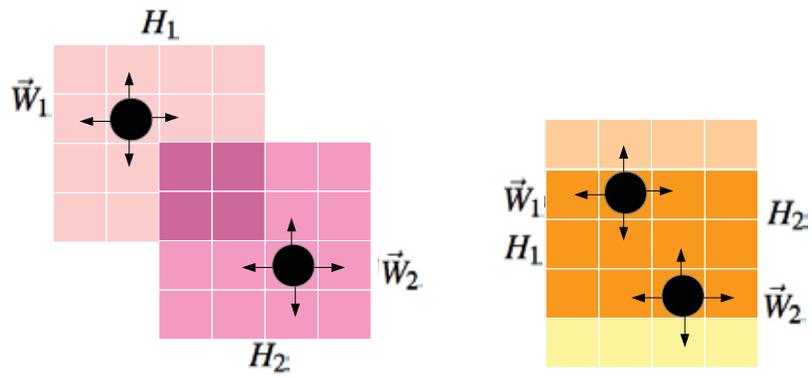


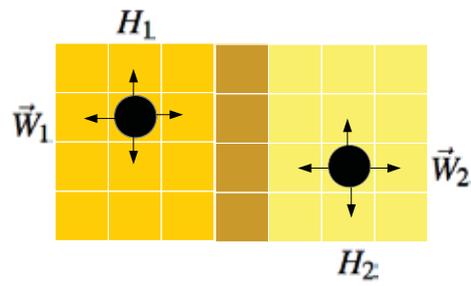
Figura 5.9: Varianza $\langle T^2 \rangle - \langle T \rangle^2$ vs ℓ^2 para $m_1, m_2 = 1$ y $m_1, m_2 = \ell$.

menor.



(a) Traslape $m_1 = \ell/2; m_2 = \ell/2$

(b) Traslape $m_1 = \ell; m_2 = \ell - 1$



(c) Traslape $m_1 = 1; m_2 = \ell$

Figura 5.10: Diferentes traslapes.

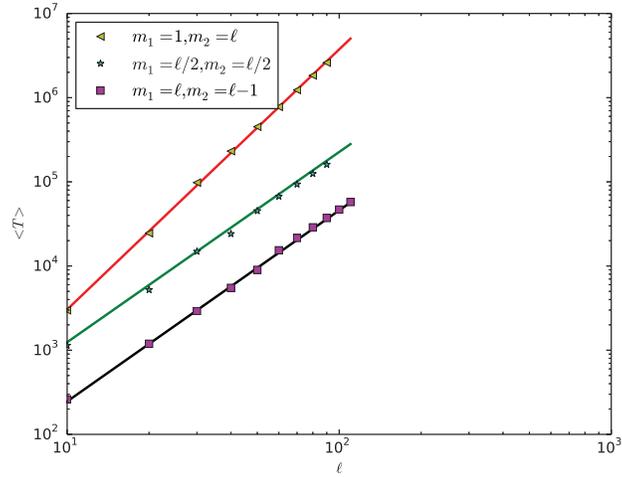


Figura 5.11: Escalamiento del $\langle T \rangle$ para $(m_1 = 1, m_2 = \ell)$ en color rojo ($\sim \ell^{3.09} \log \ell$), $(m_1 = \ell/2, m_2 = \ell/2)$ en color negro ($\sim \ell^{2.27}$) y $(m_1 = \ell, m_2 = \ell - 1)$ en color verde ($\sim \ell^{2.26}$).

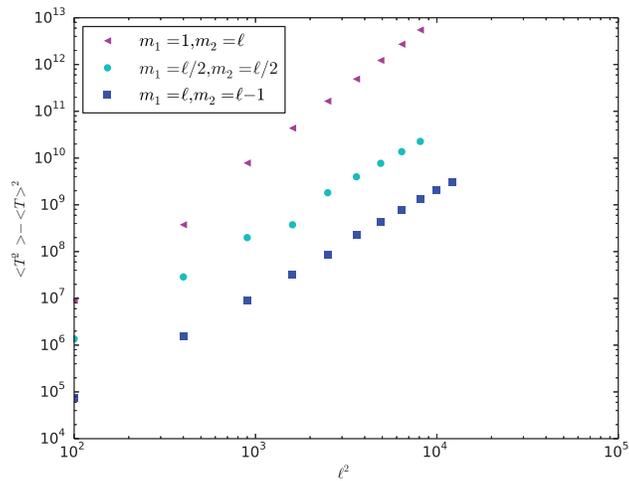


Figura 5.12: Varianza $\langle T^2 \rangle - \langle T \rangle^2$ vs ℓ^2 para $(m_1 = 1, m_2 = \ell)$, $(m_1 = \ell/2, m_2 = \ell/2)$, y $(m_1 = \ell, m_2 = \ell - 1)$.

Conclusiones

En este trabajo, se llevó a cabo una investigación de tiempos de primer encuentro para dos caminantes aleatorios confinados. Logramos realizar un mapeo, para transformar el caso de dos caminantes aleatorios a un solo caminante en una dimensión del doble de la original. Por primera vez, se encontró la distribución de probabilidad de los tiempos de encuentro de dos caminantes utilizando el método de enumeración exacta. Para comprobar estos resultados, se implementó también el método de Monte Carlo. Se estudiaron las distribuciones de probabilidad, el promedio y la varianza de los tiempos de encuentro para caminantes aleatorios confinados en territorios que se traslapan, en una y dos dimensiones.

- Se encontró que el promedio en 1D para $m = \ell$ escala asintóticamente como ℓ^2 , mientras que para $m = 1$.
- Para enumeración en 1D para $m = 1$ se encontró que se ajusta en escala logarítmica como $\ell^{2.27}$
- Las varianzas para Monte Carlo y enumeración coinciden, lo cual comprueba que el cálculo que se realizó para calcular la varianza es correcto.
- Para 1D y $m = \ell$ se encontró que en escala logarítmica la varianza va como ℓ^4 .
- En 2D para los casos extremos, los cálculos realizados con enumeración y con Monte Carlo coincidieron, lo cual muestra que nuestra implementación fue correcta.

- El tiempo de encuentro promedio para $(m_1, m_2) = (1, 1)$ escala como $\ell^{2.27}$, mientras que para $(m_1, m_2) = (\ell, \ell)$ escala como ℓ^4 .

Lo interesante en estos resultados es que pudimos encontrar la distribución de probabilidad completa para los tiempos de primer encuentro, y validar los resultados de tiempos de encuentro promedio que ya habían sido obtenidos con otro método numéricamente exacto.

Como trabajo futuro, sería muy interesante cambiar el tipo de red en donde se mueven los caminantes; por ejemplo, tener redes complejas, las cuales nos ayudarían a entender la propagación de epidemias cuando se viaja en avión de un país a otro.

En el caso bidimensional queda el implementar una manera más eficiente de calcular todos los posibles traslapes. En este trabajo se logro implementar pero por cuestiones de tiempo no se pudieron obtener los resultados.

Bibliografía

- [1] P. Hänggi, P. Talkner, and M. Borkovec. Reaction-rate theory: fifty years after Kramers. *Rev. Mod. Phys.*, 62(2):251–341, (1990).
- [2] M. Coppey, O. Bénichou, R. Voituriez, and M. Moreau. Kinetics of target site localization of a protein on dna: A stochastic approach. *Biophysical Journal*, 87(3):1640–1649, (2004).
- [3] O. Bénichou, C. Loverdo, M. Moreau, and R. Voituriez. Intermittent search strategies. *Rev. Mod. Phys.*, 83:1104.0639v1, (2011).
- [4] H. Tuckwell. *Introduction to Theoretical Neurobiology*. Cambridge University Press, (1988).
- [5] L. Giuggioli, S. Pérez-Becker y D.P. Sanders. Encounter times in overlapping domains: application to epidemic spread in a population of territorial animals. *Phys. Rev. Lett.* 110 (5): 058103/1-5. (2013).
- [6] S. Pérez Becker, *Tiempo de primer encuentro en caminantes aleatorios confinados (Tesis de Maestría)*, Posgrado en Ciencias Física, Universidad Nacional Autónoma de México (2011).
- [7] L.Giuggioli, JR & Harris. Animal interactions and the emergence of territoriality. *PLoS Computational Biology*, vol 7., pp. 1 - 9, (2011).

- [8] <https://jaimesotou.files.wordpress.com/2011/05/metodo-montecarlo-03.pdf>, Simulación método de Monte Carlo, Jaime Soto.
- [9] I. Majid, D. Ben-Avraham, S. Havlin, and H. E. Stanley, Exact-enumeration approach to random walks on percolation clusters in two dimensions. *Phys. Rev. B*, 30, 1626 (1984).
- [10] S. Condamin, O. Bénichou, and M. Moreau. Random walks and Brownian motion: A method of computation for first-passage times and related quantities in confined geometries. *Phys. Rev. E*. 75.021111 (2007).
- [11] K. Pearson. The problem of the random walk. *Nature*, 72:294, 1905.
- [12] N. G. van Kampen. *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*. North-Holland, third edition, (2007).
- [13] N. W. Goel and N. Richter-Dyn. *Stochastic Models in Biology*. Academic Press, (1974).
- [14] M. Doi and S. F. Edwards. *The Theory of Polymer Dynamics*. Clarendon Press, (1986).
- [15] G. H. Weiss. *Aspects and Applications of the Random Walk*. North-Holland, (1994).
- [16] De la Horra Navarro, Julián, *Estadística Aplicada*. Diaz de Santos.
- [17] Murray R. Spiegel, *Probabilidad y Estadística*. McGraw-Hill.