UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

VALORACIÓN DE PROCESOS ESTOCÁSTICOS A IMÁGENES DE RESONANCIA MAGNÉTICA

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

Matemático

PRESENTA:

Edmundo Pacheco Blas

DIRECTOR DEL TRABAJO:

Roberto Velasco Segura

Ciudad Universitaria, CDMX 2019

Universidad Nacional Autónoma de México
UNAM
Biblioteca Central
Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

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.

Abstract

En esta tésis se aproxima la ecuación de Fokker-Planck por medio de dos métodos: Diferencias Finitas y un esquema de Monte Carlo. Esto se hizo con el fin de comparar y establecer cuál de los métodos es óptimo para aproximar a la ecuación, cuando esta es de dimensión arbitraria. Otro propósito es ilustrar y exhibir de manera intuitiva la relación que hay entre una Difusión de Itô y la ecuación de Fokker-Planck.

Este trabajo tiene como objetivo principal aportar herramientas computacionales innovadoras al estudio de series de tiempo de Resonancias Magnéticas, principalmente para aquellas medidas en estado de reposo. La aplicación de este trabajo, se está desarrollando en la tesis doctoral de María del Lucero Pacheco Blas bajo la dirección del Dr. Pablo Padilla Longoria.

El modelo considera principalmente el coeficiente de arrastre de la ecuación de Fokker-Planck, con este se indicica a la ecuación la relación que hay, por la actividad, entre las regiones en el cerebro. Para ello se deberán utilizar matrices de correalción generadas con las series de tiempo de Resonancia Magnética. Sin embargo, las simulaciones relevantes a la comparación de los métodos numéricos, por simplicidad, únicamente consideran un coeficiente de difusión constante. Aunque se preparó un código en lenguaje Julia para la aplicación deseada, el término de arrastre no utiliza una matriz de correlación para las simulaciones de este trabajo. Esto es porque la meta principal es determinar qué método numérico se debe utilizar en la aplicación deseada.

Dedicatoria

A mi hermano.

Dedico los méritos de este trabajo al beneficio de todos los seres sintientes y a mi propia realización espiritual.

Agradecimientos

A Juan y Ana, mis padres, los amo.

A Daniela y toda su familia, especialmente a sus padres.

A mi familia, mi impulso.

A mis amigas y amigos. Los quiero muchísimo, también son mi familia.

A la UNAM. Especialmente a la Facultad de Ciencias, mi otro hogar.

A todos mis profesores, maestras y mentores de todo tipo. Especialmente a Miguel, por transmitirme el amor al arte. También a Sergio I. López O., por indicarme el enfoque correcto para este trabajo.

A Roberto, sin su guía, paciencia y enseñanzas este trabajo no hubiera sido posible.

Al equipo de trabajo, en especial a Lucero por invitarme a participar y a Pablo por este maravilloso tema de tesis.

A mis sinodales, por sus comentarios, correcciones y atención. Especialmente a Stan por todo su gran apoyo.

Somos las partículas brownianas que se difunden en un asombroso mundo aleatorio de armonía; se encuentran y se impulsan, cambian de rumbo y siguen. Con un poco de paciencia y trabajo, aprendemos a colisionar en la dirección correcta. Algunas veces, incluso podemos ver que en todo momento estamos donde tenemos que estar.

ÍNDICE

Página

Índice de Tablas **xiii**

Índice de Figuras **xv**

1 Introducción **1**

1.1 Planteamiento y Motivación 1

2 Definiciones Preliminares **5**

2.1 Primeras Definiciones 5

2.1.1 Ecuación Diferencial Parcial 5

2.1.2 Condiciones de Frontera 6

2.1.3 Conceptos Básicos de Probabilidad 7

2.1.4 Esperanza, Varianza y Correlación 9

2.2 Ecuaciones Diferenciales Estocásticas 10

2.2.1 Proceso Estocástico y Movimiento Browniano 10

2.2.2 Caminatas Aleatorias 12

2.2.3 Histogramas 13

2.2.4 Ecuaciones con Ruido 14

3 La Ecuación de Fokker-Planck y su Aplicación **17**

3.1 De una SDE a la Ecuación de Fokker-Planck 17

3.1.1 Ecuaciones de Itô 17

3.1.2 La Fórmula de Itô 18

3.1.3 Generador de una Difusión de Itô 19

3.1.4 Las Ecuaciones de Kolmogorov 21

3.2 La Ecuación de Fokker-Planck 23

3.2.1 Fokker-Planck con Coeficientes Constantes 23

3.3 Fokker-Planck con Difusión Constante y su Aplicación 25

3.3.1 Dominio de la Ecuación 26

3.3.2 Coeficiente de Arrastre 26

3.3.3 Estados Iniciales 28

4 Métodos Numéricos **29**

4.1 Dominios Numéricos de la Función 29

4.2 Diferencias Finitas 30

4.2.1 Diferencias Finitas de Segundo Orden 32

4.2.2 Un Algoritmo de Condiciones de Frontera para Diferencias Finitas 32

4.2.3 Fokker-Planck en FDTD 33

4.2.4 División Dimensional 35

4.3 Fokker-Planck con DS 36

4.3.1 Mallas del Término de Arrastre 38

4.4 Euler-Maruyama 39

4.4.1 Solución Analítica de una SDE 41

4.4.2 Fokker-Planck con Caminatas e Histogramas 42

4.4.3 Cantidad de Bins en el Histograma 42

4.5 Condiciones Iniciales en los Métodos Numéricos 43

4.6 Errores de Aproximación 44

4.6.1 Error Relativo en FDTD 45

4.6.2 Errores por Convergencia Débil y Fuerte en Euler-Maruyama 46

4.7 Errores Mixtos 47

4.7.1 Error Relativo en Euler-Maruyama 47

4.7.2 Error por Convergencia Débil en FDTD 48

4.7.3 Orden del Error de Convergencia 49

4.8 Herramientas Relevantes para las Simulaciones 50

5 Resultados **51**

5.1 Valoración Gráfica de los Métodos Numéricos 52

5.1.1 Dimensión 1, Ecuación de Fokker-Planck con Término de Arrastre Constante 53

5.1.2 Dimensión 1, Ecuación de Fokker-Planck con Término de Arrastre Lineal 55

5.1.3 Dimensión 2, Ecuación de Fokker-Planck con Término de Arrastre Constante 56

5.1.4 Dimensión 2, Ecuación de Fokker-Planck con Término de Arrastre Lineal 57

5.1.5 Dimensión 3, Ecuación de Fokker-Planck con Término de Arrastre Constante 59

5.1.6 Dimensión 3, Ecuación de Fokker-Planck con Término de Arrastre Lineal 60

5.2 Errores por Convergencia Débil y Fuerte 61

5.2.1 Convergencia Débil 62

5.2.2 Convergencia Fuerte 64

5.3 Convergencia de η 66

5.3.1 Ecuación con Término de Arrastre Constante 66

5.3.2 Ecuación con Término de Arrastre Lineal 69

5.4 Error y Tiempo de Ejecución 70
5.4.1 Razones de Convergencia 70
5.4.2 Tiempos de Ejecución 72

6 Conclusiones **75**
6.1 Valoración de los Resultados 75
6.2 El Método para la Aplicación 76

A Apéndice de Probabilidad **79**
A.1 Medida y Espacio de Probabilidad 79
A.2 $\mathbb{B}_{\mathbb{R}}$ 80
A.3 Integral con Respecto a una Medida 81
A.4 Integral de Itô 82

B Apéndice del Cerebro Humano y las Resonancias Magnéticas **85**
B.1 La Ecuación de Fokker-Planck y el Cerebro 85
B.2 Sobre las Resonancias Magnéticas y la Parcelación del Cerebro 86
B.3 Sobre las Series de Tiempo 87
B.4 El estudio de las series de tiempo 88

C Sobre las Ecuaciones Diferenciales Estocásticas **89**
C.1 Einstein y el Movimiento Browniano 89
C.2 Ecuaciones de Langevin 91

Referencias **93**

Índice de Tablas

Tablas **Page**

5.1 Descripción de los parámetros de las simulaciones. 52
5.2 Parámetros de las simulaciones 1D, para la ecuación de Fokker-Planck con coeficiente de arrastre constante. 54
5.3 Parámetros de las simulaciones 1D, para la ecuación de Fokker-Planck con coeficiente de arrastre lineal. 55
5.4 Parámetros de las simulaciones 2D, para la ecuación de Fokker-Planck con coeficiente de arrastre constante. 56
5.5 Parámetros de las simulaciones 2D, para la ecuación de Fokker-Planck con coeficiente de arrastre lineal. 58
5.6 Parámetros de las simulaciones 3D, para la ecuación de Fokker-Planck con coeficiente de arrastre constante. 59
5.7 Parámetros de las simulaciones 3D, para la ecuación de Fokker-Planck con coeficiente de arrastre lineal. 60
5.8 Valores de los parámetros de las simulaciones que reflejan una mejora en el método E-M, con mejor discretización espacial. 62
5.9 Valores de los parámetros de las simulaciones correspondientes a $\gamma(\eta_w)$. 63
5.10 Tabla de $\gamma(\eta_w)$ para las primeras dimensiones. 63
5.11 Tabla de $\gamma(\eta_w)$ con mayor M. 64
5.12 Valores de los parámetros de las simulaciones correspondientes a $\gamma(\eta_s)$. 65
5.13 Tabla de $\gamma(\eta_s)$ para las primeras dimensiones. 65
5.14 Tabla de $\gamma(\eta_s)$ para E-M con mayor M. 66
5.15 Parámetros de las simulaciones utilizadas para medir $\gamma(\eta)$ con la ecuación con término de arrastre constate. 67
5.16 Tabla de $\gamma(\eta)$ para las primeras dimensiones. 68
5.17 Tabla de $\gamma(\eta)$ del método EM con distintos valores de M. 68
5.18 Parámetros de las simulaciones utilizadas para medir $\gamma(\eta)$ con la ecuación con término de arrastre constate. 69
5.19 Razones de convergencia del error η del método E-M lineal. 70
5.20 Tiempo de ejecución $M = 10^4$. 72

5.21 Tiempo de ejecución M exp. 72

Índice de Figuras

Figuras		Página
2.1	Proceso estocástico	11
2.2	Movimiento browniano en $\mathbb{R}^3$	12
2.3	Caminata aleatoria	13
2.4	Histograma	14
3.1	Condición inicial delta de Dirac	24
3.2	Dominio 1D	26
3.3	Series de tiempo rs fcMRI	27
3.4	Condiciones iniciales	28
4.1	Central FDTD stencil.	31
4.2	Malla 2D, Δx	35
4.3	Malla 2D, Δy	35
4.4	Mallas 2D, FDTD	35
4.5	Malla 3D y planos 2D	36
4.6	Mallas 2D del dominio espacial	37
4.7	Campo vectorial 2D	37
4.8	Sábana normal 2D vista en 3D.	43
4.9	Sábana normal 2D vista en 2D.	43
4.10	Histograma 2D visto en 3D.	44
4.11	Histograma 2D visto en 2D.	44
4.12	Distancia a la condición inicial.	45
5.1.1.0.1	Comparación 1D, ecuación de Fokker-Planck con término de arrastre constante	54
5.1.2.0.1	Comparación 1D ecuación de Fokker-Planck con término de arrastre lineal	55
5.1.3.0.1	Comparación 2D, arrastre constante	57
5.1.4.0.1	Comparación 2D, arrastre lineal	58
5.1.5.0.1	t = 0.4	60
5.1.5.0.2	t = 0.85	60

5.1.5.0.3	t = 1.5	60
5.1.5.0.4	Comparación 3D, arrastre constante	60
5.1.6.0.1	Comparación 3D, arrastre lineal	61
5.2.0.0.1	Visualización de la aproximación con E-M utilizando un dominio temporal con mayor cantidad de pasos.	62
5.2.1.0.1	Gráficas de η_w para las primeras dimensiones.	63
5.2.1.0.2	Visualización de la convergencia de FDTD 1D con mayor cantidad de muestras aleatorias.	64
5.2.2.0.1	Gráficas de η_s para las primeras dimensiones.	65
5.2.2.0.2	Visualización de la convergencia de E-M con mayor cantidad de muestras aleatorias.	66
5.3.1.0.1	Gráfica de η para la ecuación con arrastre constante.	67
5.3.1.0.2	Gráfica de η para la ecuación con arrastre constante en el método de E-M sin suficientes caminatas aleatorias.	68
5.3.2.0.1	Convergencia de η en el método de Euler-Maruyama con arrastre lineal	69
5.4.1.0.1	Ajuste con regresión lineal para la predicción de η_w de ambos métodos.	71
5.4.1.0.2	Ajuste con regresión lineal para la predicción de η_s de EM.	71
5.4.2.0.1	Gráficas del ajuste lineal del tiempo de ejecución 1.	73
5.4.2.0.2	Gráficas del ajuste lineal del tiempo de ejecución 2.	73
6.1.0.0.1	Tabla 1 de comparación de los métodos numéricos.	75
6.1.0.0.2	Tabla 2 de comparación de los métodos numéricos.	76
B.1.0.0.1	Canales iónicos	85
B.4.0.0.1	Ciclo MRI	88

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

1.1 Planteamiento y Motivación

La ecuación de Fokker-Planck tienen aplicaciones en física, biología, finanzas y otras disciplinas. La solución de algún caso particular es una densidad de probabilidad cuya interpretación queda sujeta a los parámetros y variables que recibe como argumentos. En la aplicación que se considera en esta tesis, la solución describe la evolución temporal de la probabilidad de activación de regiones en el cerebro; es decir la función de densidad de probabilidad de activación conjunta de las regiones que se recibe como parámetros. Dada dicha aplicación, será de gran utilidad resolver una ecuación de Fokker-Planck en dimensión arbitraria.

La ecuación de Fokker-Planck es una Ecuación Diferencial Parcial que describe la evolución temporal de la Función de Densidad de Probabilidad de una Variable Aleatoria de tipo Proceso Estocástico, dicho Proceso Estocástico es a su vez descrito por una Ecuación Diferencial Estocástica. La función de densidad descrita por una ecuación de Fokker-Planck dada, es la función de densidad de un Proceso Estocástico conocido como difusión de Itô. La relación entre una ecuación de Fokker-Planck y una difusión de Itô no es intuitiva pues una ecuación es determinista y la otra aleatoria, sin embargo ambas ecuaciones tienen un término de arrastre y uno de difusión y se desea estudiar si con ambas ecuaciones se puede obtener la misma información aunque esto sea con distinta granularidad o detalle.

Se tiene interés en resolver una ecuación de Fokker-Planck en dimensión arbitraria, sin embargo dado que no siempre es posible dar una solución analítica de dicha ecuación, en este caso se emplean herramientas numérico-computacionales. Para este trabajo se implementaron dos métodos numéricos, Diferencias Finitas y Euler-Maruyama que sirven para Ecuaciones Diferenciales Parciales y Ecuaciones Diferenciales Estocásticas respectivamente. Esto se hace con el fin de

comparar y validar que efectivamente es posible obtener con características distintas la misma información con ambas ecuaciones, esto permite aproximar la solución de la ecuación de Fokker-Planck de dos maneras distintas aún en los casos donde no se cuenta con una solución analítica.

La aplicación que motiva a resolver numéricamente la ecuación de Fokker-Planck en esta tesis es el análisis de series de tiempo rsfMRI (*resting state functional Magnetic Resonance Imaging*), ver apéndice B. En el proyecto "Alteraciones neurocognitivas en la adolescencia temprana por el consumo de inhalantes" de la Secretaría de Salud, cuyo responsable fue la Dra. Nadia González García del Hospital Infantil de México Federico Gómez, se obtuvieron datos que ayudaron a determinar en gran medida los requerimientos y funciones de los métodos aquí planteados.

Para el análisis de los datos mencionados, se considera que cada serie de tiempo representa la actividad de alguna región, la cual es determinada por una parcelación del cerebro. Se propone estudiar la actividad de algunas regiones y la manera en que el estado de activación de una región puede influenciar el estado de activación de otras regiones. El análisis de estas series de tiempo implica dimensión alta en la ecuación, pues la cantidad de regiones representa la cantidad de variables independientes que se utilizan para definir la ecuación de Fokker-Planck y éstas pueden ser de orden 264.

Es importante mencionar que no es usual utilizar a la ecuación de Fokker-Planck para analizar regiones de neuronas. En el apéndice B se dan algunas referencias en las cuales utilizan ésta ecuación para simular dinámica de neuronas, es decir, la utilizan para estudiar parejas o grupos pequeños de neuronas. Fue durante el trabajo doctoral de María del Lucero Pacheco Blas dirigido por el Dr. Pablo Padilla Longoria que se planteo utilizar a la ecuación de Fokker-Planck para analizar regiones de neuronas y simular la interacción entre éstas utilizando una matriz de correlación (de las series de tiempo correspondientes a las regiones) para determinar uno de los coeficientes de la ecuación.

La aplicación que motiva este trabajo se beneficia de considerar estados iniciales y matrices de correlación que serán definidas en el marco teórico. Estos parámetros ayudan a definir una ecuación de Fokker-Planck cuya solución brinda información sobre el estado de la activación de las regiones del cerebro. Aunque estos parámetros son de gran importancia sólo sirven en medida que se elige una versión de la ecuación adecuada para modelar la actividad de las regiones, las funciones que se utilizan en el término de arrastre y en el término de difusión juegan roles tan importantes como los parámetros que recibe la ecuación de Fokker-Planck.

Sin embargo, utilizar de manera concreta la ecuación de Fokker-Planck para predecir estados de activación en las regiones del cerebro no es la meta de esta tesis. Antes de utilizar algún modelo

específico para estudiar la influencia que hay en las regiones del cerebro, es necesario establecer: qué se puede esperar de las aproximaciones numéricas y cuáles son sus limitaciones.

Antes de abordar la parte numérica que permite aproximar la ecuación de Fokker-Planck, es necesario establecer de manera teórica la relación que guardan los distintos elementos que se utilizan a lo largo de la tesis. Esto corresponde a la derivación de la ecuación de Fokker-Planck a partir del cálculo de Itô, que se describe en los primeros capítulos: 1, 2, y 3 de este trabajo que a su vez se apoyan en el apéndice A.

Asimismo en el capítulo 4 se describen los métodos numéricos con los cuales se hacen las simulaciones que permiten hacer la comparación entre las herramientas que se utilizan para aproximar las ecuaciones diferenciales de ambos tipos. Estas comparaciones, se encuentran en el capítulo 5 y constituyen el contenido principal de este trabajo, ya que a partir de ellas se buscan concluir las hipótesis aquí planteadas. Para poder concluir se utilizan distintas gráficas y tablas en las que se exhiben los resultados principales de manera clara y concreta, esto corresponde al capítulo 6 de este trabajo.

CAPÍTULO 2

DEFINICIONES PRELIMINARES

Antes de presentar la ecuación de Fokker-Planck podemos establecer los conceptos y las definiciones que se necesitarán a lo largo de la tesis. En este capítulo, y en el apéndice (A), se dan las bases y los fundamentos teóricos pertinentes para plantear la ecuación de Fokker-Planck y la conexión que se muestra de manera heurística entre las ecuaciones estocásticas y las ecuaciones diferenciales parciales.

Las referencias principales de donde se tomaron los conceptos para la sección de ecuaciones diferenciales parciales y condiciones de frontera son el libro de Giordano [13, Capítulo 1] y de *Lawrence* [10, Capítulo 1]. Para la sección de probabilidad se utilizaron los libros de *Oksendal* [32, Capítulo 3] y de García Álvarez [1, Capítulos 5 al 9], entre otros.

2.1 Primeras Definiciones

2.1.1 Ecuación Diferencial Parcial

La ecuación de Fokker-Planck se puede derivar desde un contexto estocástico, para ello hay varias definiciones y teoremas que se deben establecer, comenzando por definir lo que es una Ecuación Diferencial Parcial (PDE, *Partial Differential Equation*).

Definición 1. *Una PDE lineal de segundo orden de dos variables (x, y), es una ecuación de la forma:*

$$f_1(x,y)u_{xx} + f_2(x,y)u_{xy} + f_3(x,y)u_{yy} + f_4(x,y)u_x + f_5(x,y)u_y + f_6(x,y)u + f_7(x,y) = 0,$$

donde f_i es una función dada para cada $i = 1,...,7$ y donde: $u_x = \frac{\partial u}{\partial x}$, $u_{xx} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$, $u_{xy} = \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}$, $u_y = \frac{\partial u}{\partial y}$ y $u_{yy} = \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$.

Estas ecuaciones no tienen sentido hasta no recibir condiciones iniciales y de frontera. Pues no describen nada y no se sabe como se comportan en su frontera por sí mismas.

Las posibles soluciones de esta PDE son un conjunto de superficies en $\mathbb{R}^3$. Se conoce como problema de valor inicial o problema de Cauchy al problema de hallar la superficie $u_t = f(t, u(t))$ que pase por alguna curva dada cuya evolución es descrita por una PDE, es decir, donde existe $u(t_0) = u_0$ que satisface a la ecuación.

Las PDEs sirven para modelar diversos tipos de fenómenos físicos por ejemplo la razón de cambio de la temperatura, la dinámica de fluidos, la mecánica cuántica, etc. Consideremos la ecuación de crecimiento poblacional (2.1), que describe la razón de cambio de una población:

$$u_t = f(t)u(t) \qquad u(0) = u_0 \quad \text{(constante)}, \tag{2.1}$$

dónde la condición inicial u_0, puede ser el tamaño inicial de la población de alguna especie que se va a reproducir.

El concepto de PDE se puede extender a $\mathbb{R}^n$ (el espacio vectorial de coordenadas ordenadas de dimensión $n \in \mathbb{N} - \{0\}$ con entradas en los números reales) utilizando una función $u(x_1, x_2, ..., x_n)$ de n variables independientes con derivadas u_{x_i}, $i \in \{1, 2, ..., n\}$ y una función lineal:

$$F(x_1, x_2, ..., x_n, u, u_{x_1}, ..., u_{x_n}, u_{x_1 x_2}, ..., u_{x_{n-1} x_n}) = 0,$$

donde F depende la función u y las derivadas u_{x_i}, $u_{x_i x_j}$ de u.

2.1.2 Condiciones de Frontera

En las PDEs las condiciones de frontera juegan uno de los roles más importantes para modelar un fenómeno. Por ejemplo en el caso de la ecuación de calor:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

que describe la manera en la que se difunde el calor en un objeto alargado (cilíndrico). Considerando la temperatura de los extremos de dicho objeto, se tendrán condiciones de frontera para este fenómeno. Antes de plantear las condiciones de frontera hace falta el concepto de bola abierta (en $\mathbb{R}^n$) para poder definir el concepto de frontera.

Definición 2. *Una bola abierta con centro en un punto $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ y radio $\epsilon > 0$ es el conjunto:*

$$B_\epsilon(\boldsymbol{x}) = \{\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n \big| ||x - y|| < \epsilon\}$$

Definición 3. *Sea $A \subset \mathbb{R}^n$ la frontera de A, Fr(A), es el conjunto de puntos:*

$$\{x \in \mathbb{R}^n | \forall \epsilon > 0,\ B_\epsilon(\boldsymbol{x}) \cap A \neq \emptyset \text{ y } B_\epsilon(\boldsymbol{x}) \cap A^c \neq \emptyset\}\ .$$

Las condiciones de frontera describen a las PDE's en la frontera de su dominio. Se denomina problema de contorno a aquél que consiste en resolver una PDE sujeta a condiciones de frontera. En esta tesis se darán condiciones de frontera conservativas cuyo propósito es acumular el área de la solución de una PDE en la frontera, sin embargo adicionalmente se contemplaron dos de las condiciones de frontera usuales:

Definición 4. *Las condiciones de frontera de Dirichlet se usan cuando se conoce el valor de la ecuación en la frontera, es decir, si la ecuación toma un valor constante, o descrito por una función escalar, al llegar a la frontera. Para $\frac{\partial y}{\partial x}$ con $x \in [a,b]$ se tendrá:*

$$y(a) = f(a) \quad y \quad y(b) = f(b).$$

Definición 5. *Las condiciones de frontera de Neumann se usan cuando se conoce el valor de la derivada de la ecuación en la frontera. Si la derivada de la ecuación toma un valor constante, o es descrito por una función escalar, al llegar a la frontera. Para $\frac{\partial y}{\partial x}$ con $x \in [a,b]$ se tendrá:*

$$\frac{\partial y}{\partial x} = f(a) \quad y \quad \frac{\partial y}{\partial x} = f(b).$$

En la sección (4.2.2) se describe un algoritmo que utiliza condiciones de frontera de Dirichlet de manera implícita. Aunque este algoritmo no se hace presente durante las simulaciones relevantes para los resultados de esta tesis, es importante mencionar que para la aplicación que se tiene en mente se pueden emplear todas estas condiciones de frontera, en particular se consideraron aquellas descritas por el algoritmo mencionado.

Las condiciones de frontera no se hacen presentes en las simulaciones pues la intención de este trabajo es una comparación cuantitativa del error que hay para los métodos numéricos al aproximar las respectivas ecuaciones antes de llegar a la frontera. Sin embargo, para que nuestro modelo esté bien definido se pueden considerar las condiciones conservativas que se describen en el algoritmo antes mencionado.

2.1.3 Conceptos Básicos de Probabilidad

El primer concepto de probabilidad relevante para el desarrollo de esta tesis es el de variable aleatoria, aunque cabe mencionar que hay definiciones de probabilidad y teoría de la medida preliminares que se encuentran en el apéndice A.

Definición 6. *Sea* $(\Omega, \Sigma, \mathbb{P})$ *un espacio de probabilidad (ver definición A: 24), una variable aleatoria real es una función* $X : \Omega \to \mathbb{R}$ *tal que* $[X \leq x] \in \Sigma$ *para cualquier* $x \in \mathbb{R}$*, es decir,* X *es una función* Σ*-medible.*

Este es un concepto de suma importancia en teoría de la probabilidad pues a partir de este se definen muchos otros conceptos de probabilidad. En este trabajo será de especial utilidad para definir los conceptos de proceso estocástico y movimiento browniano con los cuales se hace un desarrollo que conduce a la ecuación de Fokker-Planck. Para describir y entender mejor a las variables aleatorias se deben definir un par de funciones que se presentan a continuación.

Definición 7. *Sea* X *una variable aleatoria, la Función de Distribución Acumulada (CDF, Cumulative Distribution Function) de* X *es una función* $F_X : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ *definida como* $F_X(x) = P[X \leq x]$*, donde* P *es una medida de probabilidad (ver definición A: 23).*

Definición 8. *Sea* X *una variable aleatoria con función de distribución* F_X*. Si además existe una función no negativa Lebesgue-integrable (ver definición A: 27)* $f_X : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ *tal que:*

$$F_X(x) = \int_{-\infty}^{x} f_X(y)dy \quad \textit{para cualquier} \quad x \in \mathbb{R},$$

entonces f_X *es la Función de Densidad de Probabilidad (PDF, Probability Density Function) de* X*.*

Una función de densidad además de ser no negativa cumple que:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_X(x)dx = 1.$$

Por esta condición, que requiere que una PDF integre uno, las condiciones de frontera para una ecuación que describe el comportamiento de una ecuación como estas tendrían que ser conservativas.

Cabe observar que la diferencia entre una variable absolutamente continua y una discreta es que cuando una variable aleatoria es discreta se toma la suma y no la integral para definir la PDF de dicha variable. Del mismo modo se toma la suma para otras definiciones y propiedades que en el caso continuo son la integral.

Por otro lado la aplicación que se tiene en mente requiere de dimensión alta, por lo cual a continuación se generalizan los conceptos anteriores de manera que se pueda derivar la ecuación de Fokker-Planck en dimensión arbitraria.

Definición 9. *Decimos que* $\boldsymbol{X}$ *es un vector aleatorio en* $\mathbb{R}^n$ *(*$n \in \mathbb{N} - \{0\}$*), si es un vector cuyas coordenadas son variables aleatorias. Entonces la función de densidad de probabilidad y la función de distribución acumulada en dimensión alta son* $f_{\boldsymbol{X}}$ *y* $F_{\boldsymbol{X}}$ *respectivamente:*

$$F_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{x}) = P(X_1 \leq x_1, X_2 \leq x_2, ..., X_n \leq x_n) \qquad F_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{x}) = \int_{\mathbb{R}^n} f_{X_1,...,X_n}(x_1,...,x_n)dx_1...dx_n.$$

Una distribución importante para esta tesis es la distribución normal. Sean $\mu, \sigma \in \mathbb{R}$ y $\sigma > 0$ diremos que una variable aleatoria X se distribuye Normal, $X \sim \mathrm{N}(\mu, \sigma^2)$, si la función de densidad de X esta dada por:

$$f_X(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right).$$

El caso general de una distribución normal, es decir, una distribución normal multivariada $\mathrm{N}(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$, es el caso en el cual la PDF esta dada por:

$$f_{\boldsymbol{X}}(x_1, \cdots, x_n) = \frac{\exp\left(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^T\Sigma^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})\right)}{\sqrt{(2\pi)^n|\Sigma|}},$$

donde Σ es la matriz de covariables, que se explicara en la sección (2.1.4: 14), de $\boldsymbol{X}$ y donde $|\cdot|$ es su determinante. Esta expresión es de especial relevancia pues determina en algunos casos las condiciones iniciales que reciben los métodos numéricos.

2.1.4 Esperanza, Varianza y Correlación

Para hacer el análisis del comportamiento de un vector aleatorio se requiere de dos conceptos que describen y ayudan a entender el comportamiento de dicho vector, estos son el de media y varianza.

Definición 10. *Sea X una variable aleatoria con función de densidad f_X, diremos que tiene esperanza (o media) finita si la integral $\int_{-\infty}^{\infty} |x| f_X(x)dx$ es finita y, en ese caso, se define la esperanza de X, $\mathbb{E}[X]$ como:*

$$\mathbb{E}[X] = \int_{-\infty}^{\infty} |x| f_X(x)dx.$$

Denotaremos a la esperanza de una variable aleatoria como μ.

Para el caso multivarido simplemente se considera que la media es:

$$\mathbb{E}[\boldsymbol{X}] = (\mathbb{E}[X_1], ..., \mathbb{E}[X_n])$$

Definición 11. *Sea X tal que $\mathbb{E}[X] < \infty$. Se define a la varianza de X, $Var(X)$, como:*

$$Var(X) = \mathbb{E}\left[(X - \mathbb{E}[X])^2\right].$$

Denotaremos a la varianza como σ^2. A $\sqrt{Var(X)} = \sigma$ se le conoce como desviación estándar.

Otros dos conceptos relevantes para esta tesis son el de covarianza y correlación, estos conceptos describen el cambio de una variable aleatoria con respecto al cambio de otra variable.

Definición 12. *Si X y Y son variables aleatorias diremos que la covarianza de X y Y es:*

$$cov(X,Y) = \mathbb{E}\big[(X-\mu_X)(Y-\mu_Y)\big],$$

donde μ_X es la media de X y μ_Y es la media de Y.

Es fácil ver que cuando $X = Y$ la covarianza es la varianza de una variable aleatoria.

Definición 13. *Sean X y Y variables aleatorias con desviaciones estándar σ_X y σ_Y respectivamente, la correlación de Pearson entre X y Y es:*

$$cor(X,Y) = \frac{cov(X,Y)}{\sigma_X \sigma_Y}. \tag{2.2}$$

La matriz de correlación de un vector aleatorio es aquélla cuyas entradas son la correlación entre de las parejas de variables aleatorias que forman al vector aleatorio.

Definición 14. *Si A es la matriz de correlación de un vector aleatorio $\boldsymbol{X} = (X_1, ..., X_n)$ entonces la entrada a_{ij} de la matriz A esta dada como $a_{ij} = cor(X_i, X_j)$.*

2.2 Ecuaciones Diferenciales Estocásticas

En esta sección se explica lo que es una Ecuación Diferencial Estocástica (SDE, *Stochastic Differential Equation*). Hay distintos tipos de ecuaciones estocásticas por ejemplo las ecuaciones de Langevin (ver apéndice C), sin embargo en esta tesis se consideran las ecuaciones cuyo termino estocástico está definido mediante la integral de un movimiento browniano (integral de Itô). La referencia principal de esta sección es el libro de *Oksendal* [32, Capítulo 3].

2.2.1 Proceso Estocástico y Movimiento Browniano

Los procesos estocásticos son una familia o un conjunto de variables aleatorias, es con éstos conjuntos que se plantean las ecuaciones estocásticas de interés para esta tesis.

Definición 15. *En un espacio de probabilidad $(\Omega, \Sigma, \mathbb{P})$ un Proceso Estocástico es una colección parametrizada de variables aleatorias $\{X_t\}_{t\in I}$ con $I = [0,\infty)$ un intervalo de tiempo. En otras palabras, es una función que depende del tiempo:*

$$X_t(\omega) = X(t,\omega) : I \times \Omega \to \mathbb{R}\,,$$

con $\omega \in \Omega$ y tal que $\forall t \in I$, X_t es variable aleatoria. Cuando I es discreto diremos que es un proceso estocástico discreto, y cuando Ω es discreto diremos que es un proceso estocástico discreto en el espacio. En distintos casos diremos que X_t es continuo o continuo en el espacio, respectivamente.

Como un proceso estocástico depende del tiempo, para cada instante t se tendrá una variable aleatoria representada por X_t, de manera que su función de densidad de probabilidad f_{X_t} y su función de distribución F_{X_t} correspondientes también dependerán del tiempo. En general se define tanto a la esperanza como a la varianza en términos de cada instante $t \in I$. Si se observara la densidad en distintos instantes de algún proceso estocástico se podría ver una imagen similar a la figura (2.1).

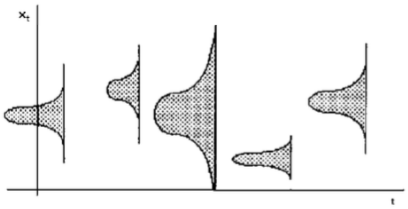

Figura 2.1: Proceso estocástico (fuente de la imagen: dmae.upct.es).

Llamaremos estados a los posibles valores que puede tomar un proceso estocástico, se puede tener un espacio de estados discreto o un espacio de estados continuo, en caso de que la variable puede sea discreta o continua en el tiempo respectivamente. En el caso de procesos estocásticos con espacio de estados discreto, una secuencia de variables que indique el valor del proceso en instantes sucesivos se suele representar como:

$$\{X_0 = x_0, X_1 = x_1, ..., X_{t_n} = x_{t_n}\} .$$

Llamamos probabilidad de transición o probabilidad de cambio de estado a la medida de probabilidad tal que:

$$P(X_{t_n} = x_{t_n} | X_{t_n - 1} = x_{t_n - 1}) ,$$

y denotaremos por P^x a la medida de probabilidad tal que el estado inicial de X_t es x.

Continuando con las definiciones necesarias para presentar las ecuaciones estocásticas, a continuación se define un movimiento browniano:

Definición 16. *[16] [21, Capítulo 2] Un movimiento browniano escalar estándar, o un proceso de Wiener estándar, B_t es un proceso estocástico $B_t, t \geq 0$,, diremos que B_t es un movimiento browniano escalar estándar si:*

1. $P[B_0 = 0] = 1$.
2. *Para $0 \leq s < t$ la variable aleatoria con incrementos de tamaño $B_t - B_s$ se distribuye Normal con parámetros $\mu = 0$ y $\sigma^2 = t - s$ es decir:*

$$B_t - B_s \sim N(0, t-s) = \sqrt{t-s}\, N(0,1).$$

3. *Para* $0 \leq s < t < q < r$ *las variables* $B_t - B_s$ *y* $B_r - B_q$ *son independientes.*

4. B_t *tiene trayectorias continuas:*

$$t \mapsto B_t.$$

Podemos pensar en procesos estocásticos o movimientos brownianos en una dimensión mayor ($n \in \mathbb{N} - \{0\}$) si consideramos a estos procesos como vectores:

$$\boldsymbol{X}(t) = \Big(X_1(t), \ \dots, X_n(t)\Big) \qquad \boldsymbol{B}(t) = \Big(B_1(t), \ \dots, B_n(t)\Big),$$

donde cada coordenada X_i o B_i es un proceso estocástico o movimiento browniano de una dimensión respectivamente. Alternativamente en algunas ocasiones se escriben a estos vectores con la notación:

$$\boldsymbol{X}_t = \Big(X_t^{(1)}, \ \dots, X_t^{(n)}\Big) \qquad \boldsymbol{B}_t = \Big(B_t^{(1)}, \ \dots, B_t^{(n)}\Big),$$

o simplemente:

$$\boldsymbol{X}_t = \Big(X_t^1, \ \dots, X_t^n\Big) \qquad \boldsymbol{B}_t = \Big(B_t^1, \ \dots, B_t^n\Big),$$

siendo esta última la que se ocupa en esta tesis.

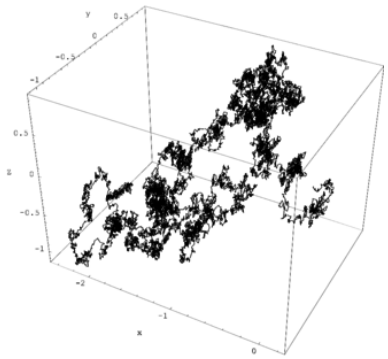

Figura 2.2: Movimiento browniano en $\mathbb{R}^3$ (imagen recuperada de: wikipedia.org).

2.2.2 Caminatas Aleatorias

Antes de continuar con la definición de ecuación estocástica es importante definir un proceso estocástico de especial interés para este trabajo, tal proceso es el de caminata aleatoria:

Definición 17. *Una caminata aleatoria es un proceso estocástico formado por una suma de variables aleatorias independientes idénticamente distribuidas [15, Capítulo 1].*

$$S_n = x_0 + X_1 + \dots + X_n \ ,$$

donde x_0 *es el valor inicial o punto de partida para la caminata.*

Es importante resaltar que un movimiento browniano se puede aproximar utilizando una caminata aleatoria [15, Capítulo 1], donde las variables aleatorias de dicha caminata son normales. Esto se debe a grandes rasgos a que los pasos del movimiento browniano se distribuyen $N(0,1)$ y que los incrementos son independientes y estacionarios, esto hace posible su discretización de dicho movimiento browniano.

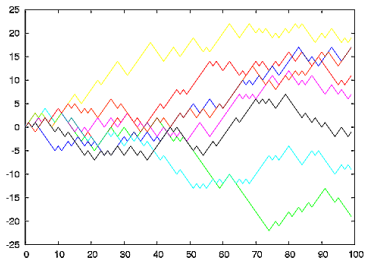

Figura 2.3: Ejemplo de caminatas aleatorias (imagen de wikipedia.org).

Por otro lado, dado que la ecuación de Fokker-Planck es una PDE, se pueden utilizar herramientas estadísticas para aproximarla. Un histograma de las caminatas aleatorias puede aproximar la densidad de probabilidad del proceso estocástico que corresponde a la ecuación. La relación entre la ecuación de Fokker-Planck y un proceso estocástico será descrita en el capítulo (3)

2.2.3 Histogramas

Los histogramas cuantifican la frecuencia de los eventos dada una discretización del dominio espacial, los intervalos de dicha discretización reciben el nombre de regiones. Aunque el refinamiento de dicha discretización no está determinado por la cantidad de eventos a cuantificar, esta se ve muy beneficiada al considerar la cantidad de eventos, ya que una discretización fina para una muestra aleatoria pequeña produce una mala aproximación de la densidad de probabilidad [4].

Naturalmente es posible extender el concepto de histograma a mayor dimensión utilizando regiones pequeñas en la dimensión de interés, en lugar de intervalos para contar la frecuencia de los eventos que se desean cuantificar.

Un histograma se puede visualizar mediante una representación gráfica de la frecuencia de eventos que se distribuyen a lo largo de un dominio espacial, dicha frecuencia representa de manera discreta la densidad de probabilidad de la variable aleatoria que produce dichos eventos.

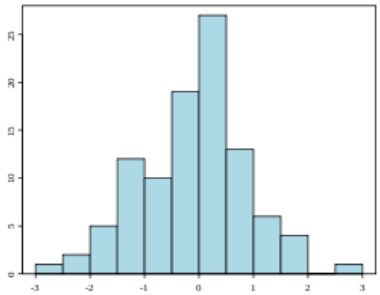

Figura 2.4: Histograma

Los histogramas pueden aproximar la densidad de probabilidad de una variable aleatoria, figura (2.4). Aplicando un histograma, en un tiempo t_i, se obtiene la cantidad de caminantes que hay en cada bin (cada elemento de la partición). Éste aproxima la densidad de probabilidad conjunta que corresponde a la solución de la ecuación de Fokker-Planck de mayor dimensión en dicho tiempo t_i.

2.2.4 Ecuaciones con Ruido

Antes de definir de manera formal lo que es una SDE, se explica la idea intuitiva de este tipo de ecuaciones. Consideremos la ecuación de crecimiento poblacional (2.1), esta ecuación considera una función $f(t)$ escalar como coeficiente. Utilizando ruido como factor en la función del coeficiente se observa un ejemplo heurístico de una ecuación estocástica. No siempre es posible describir una ecuación de manera determinista, es decir con factores que se pueden medir por completo, en estos casos se tienen ecuaciones con otro tipo de coeficientes, $f(t) = g(t) +$ "ruido":

$$\frac{\partial u}{\partial t} = g(t)u(t) + \text{“ruido”}\ u(t). \tag{2.3}$$

La ecuación (2.3) sirve para ilustrar lo que quiere decir que uno de los términos no sea determinista. Es razonable pensar de manera intuitiva que este término se comportará de manera aleatoria y modificara la conducta de la ecuación.

Definición 18. *Una SDE es una ecuación de la forma:*

$$dX_t = \alpha(t, X_t)\,dt + \beta(t, X_t)dW_t, \tag{2.4}$$

donde X_t es un proceso estocástico que empieza en X_0, donde α y β son funciones dadas y dW_t es "ruido" que se plantea a continuación.

Para entender mejor la ecuación (2.4) podemos considerar tanto a X_t como a W_t como procesos discretos con pasos $0 = t_0 < t_1 < ... < t_{m-1} < t_m = t$. Haciendo esto la ecuación (2.4) toma la forma:

$$X_{k+1} - X_k = \alpha(t_k, X_k)\Delta t_k + \beta(t_k, X_k)W_k\Delta t_k, \tag{2.5}$$

donde $X_k = X(t_k)$, $W_k = W_{t_k}$ y $\Delta t_k = t_{k+1} - t_k$. Resulta por razones que no se abordarán en esta tesis que es posible representar a W_t mediante un proceso estocástico generalizado llamado ruido blanco [32, Capítulo 3].

Un proceso con trayectorias continuas que cumple con las características de ruido blanco es un movimiento browniano B_t [22], es importante mencionar que aunque no es posible derivar un movimiento browniano identificaremos de manera intuitiva a su derivada dB_t como ruido. Por lo anterior podemos reemplazar a W_t con un movimiento browniano B_t:

$$X_k = X_0 + \sum_{j=0}^{k-1} \alpha(t_j, X_j)\Delta t_j + \sum_{j=0}^{k-1} \beta(t_j, X_j)\Delta B_j \ ,$$

donde $\Delta B_k = B_{t_{k+1}} - Bt_k$ reemplaza al termino $W_k \Delta t_k$ que aparece en la ecuación (2.5). Si se considera el caso en que $\Delta t_j \to 0$, se tendrá que:

$$X_t = X_0 + \int_0^t \alpha(s, X_s)ds + \int_0^t \beta(s, X_s)dB_s \ . \tag{2.6}$$

Las ecuaciones de la forma (2.4) cobran sentido después de aclarar que en la ecuación (2.6) se establece que $X_t = X_t(\omega)$ es un proceso estocástico que satisface a una ecuación:

$$X_t = \alpha(t, X_t)dt + \beta(t, X_t)dB_t \ .$$

Es importante resaltar que a la integral con respecto al movimiento browniano de la ecuación (2.6) se conoce como integral estocástica. En este trabajo utilizaremos para este tipo de integrales la definición de Itô, mejor conocida como integral de Itô (A: 29). Dado que la integral de Itô se define en un espacio de probabilidad filtrado (A: 28) las ecuaciones estocásticas también pertenecen a este espacio.

Una pequeña observación es que la ecuación (2.3) se puede interpretar como una ecuación de Langevin, cuando se da un significado preciso al termino de ruido. Éstas ecuaciones fueron las primeras ecuaciones estocásticas y que a su vez surgen de las observaciones que hizo Einstein al movimiento browniano, ver apéndice C.

CAPÍTULO 3

La Ecuación de Fokker-Planck y su Aplicación

Este capítulo tiene como fin derivar y establecer la ecuación de Fokker-Planck, para ello se presentan algunos teoremas que plantean una conexión entre las ecuaciones diferenciales parciales y las estocásticas. La referencia principal para este capítulo es el libro de *Oksendal* [32, Capítulos 4,5,7 y 8].

3.1 De una SDE a la Ecuación de Fokker-Planck

Una ecuación de Fokker-Planck se puede derivar de distintas maneras, en esta tesis se utiliza el enfoque del cálculo de Itô porque esto permite hacer una valoración mediante herramientas numéricas para determinar si la ecuación se puede aproximar en dimensión alta.

3.1.1 Ecuaciones de Itô

Hay más de un tipo de proceso estocástico que satisface una SDE, los procesos estocásticos continuos que satisfacen una SDE que son homogéneos en el tiempo se conocen como Difusión de Itô, en caso de no ser homogéneos en el tiempo se conocen como Proceso de Itô. En cada caso, la ecuación de Fokker-Planck asociada a dicho proceso estocástico también será homogénea o dependiente del tiempo según el tipo de SDE.

Al proceso estocástico $X_t(\omega) = X(t,\omega)$ se le llama Proceso de Itô si satisface una SDE:

$$dX_t = \alpha(t,X_t)\,dt + \beta(t,X_t)dB_t \tag{3.1}$$

en cambio una Difusión de Itô es un proceso estocástico X_t que satisface:

$$dX_t = \alpha(X_t)dt + \beta(X_t)dB_t. \tag{3.2}$$

donde, tanto para (3.1) como para (3.2), B_t es un movimiento browniano α y β son funciones medibles, ver (A: 21), $\alpha : [0,T] \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, $\beta : [0,T] \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^{n\times m}$ para $T > 0$. Para garantizar la existencia y unicidad de la solución de estas ecuaciones son necesarias dos condiciones:

1. Continuidad de Lipschitz,

$$||\alpha(t,x) - \alpha(t,y)|| + ||\beta(t,x) - \beta(t,y)|| \leq C(T)||x-y|| \quad x,y \in \mathbb{R}^n \quad t \in [0,T],$$

   donde C es una función escalar que depende del tiempo.

2. Crecimiento lineal,

$$||\alpha(x)|| + ||\beta(x)|| \leq D(T)||1+x|| \quad x \in \mathbb{R}^n \quad t \in [0,T],$$

   donde D es una función escalar que depende del tiempo. Cabe mencionar que la continuidad de Lipschitz implica el crecimiento lineal, al tomar a $y = \mathbf{0} \in \mathbb{R}^n$.

En la ecuación (3.2) ni α ni β dependen del tiempo, sin embargo tanto en el caso de ser una difusión de Itô como en el caso de ser proceso de Itô se les conoce como coeficiente de arrastre y coeficiente de difusión respectivamente. Estas funciones suelen pensarse como un vector y una matriz respectivamente:

$$\alpha = \left(\alpha_1, \ldots, \alpha_n\right) \qquad \beta = \begin{bmatrix} \beta_{11} & . & . & . & \beta_{1m} \\ & . & & & \\ & & . & & \\ & & & . & \\ \beta_{n1} & . & . & . & \beta_{nm} \end{bmatrix}.$$

3.1.2 La Fórmula de Itô

La fórmula de Itô es un resultado que se utiliza como identidad para calcular la diferencial de funciones que dependen de un proceso estocástico, en nuestro caso las soluciones de Ecuaciones Estocásticas. Antes de enunciarlo hay un par de cosas importantes que aclarar con respecto a un movimiento browniano, en primer lugar se asume que $(dt)^2 = (dt)(dB_t) = (dB_t)(dt) = 0$ y en segundo lugar $(dB_t)^2 = dt$ [32, Capítulo 4].

A continuación se plantea la Fórmula de Itô para dimensión uno; si X_t es una difusión de Itô y $g \in C^{1,2}\big([0,\infty) \times \mathbb{R}\big)$, es decir g es una función dos veces diferenciable de manera continua en $[0,\infty) \times \mathbb{R}$, se tiene que $Y_t = g(t, X_t)$ es difusión de Itô y más aún:

$$dY_t = \frac{\partial g}{\partial t}\,dt + \frac{\partial g}{\partial x}\,dX_t + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 g}{\partial x^2}(dX_t)^2, \tag{3.3}$$

esta fórmula se puede derivar al hacer una expansión en serie de Taylor de g hasta la segunda derivada, considerando que $g \in C^{1,2}$, sin embargo esta derivación se omite en este trabajo. Al sustituir dX_t en (3.3) se tiene:

$$dY_t = \frac{\partial g}{\partial t}\,dt + \frac{\partial g}{\partial x}\Big(\alpha_t\,dt + \beta_t dB_t\Big) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 g}{\partial x^2}\Big(\alpha_t\,dt + \beta_t dB_t\Big)^2,$$

donde $(\alpha_t\,dt + \beta_t dB_t)^2 = \alpha_t^2\,dt^2 + \alpha_t\,\beta_t\,(dt)(dB_t) + \beta_t^2\,dB_t^2 = \beta_t^2 dt$, esto es inmediato teniendo en mente las propiedades antes mencionadas de la integral estocástica. Simplificando con ayuda de lo anterior se obtiene otra versión de la fórmula:

$$dY_t = \Big(\frac{\partial g}{\partial t} + \alpha_t\frac{\partial g}{\partial x} + \frac{\beta_t^2}{2}\frac{\partial^2 g}{\partial x^2}\Big)\,dt + \beta_t\frac{\partial g}{\partial x}dB_t.$$

La Fórmula de Itô se puede generalizar para dimensión ($n \in \mathbb{N} - \{0\}$), para enunciar dicha generalización se cambia brevemente la notación, para que la fórmula sea clara y compacta, en la siguiente expresión se considera que los subíndices indexan coordenadas espaciales de manera que el índice temporal es omitido. Si $X(t)$ es una difusión de Itô n-dimensional $dX(t) = \alpha\,dt + \beta\,dB(t)$ y $g \in C^{1,2}$ tal que $g : [0,\infty) \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^p$, $g(t,x) = (g_1(t,x),...,g_p(t,x))$, se tiene que $Y(t,\omega) = g(t,X(t))$ es un proceso de Itô y la componente k-ésima de Y esta dada por:

$$dY_k = \frac{\partial g_k}{\partial t}\,dt + \sum_i \frac{\partial g_k}{\partial x_i}dX_i + \frac{1}{2}\sum_{i,j}\frac{\partial^2 g_k}{\partial x_i \partial x_j}(t,X)dX_i dX_j. \tag{3.4}$$

En este caso se consideran las propiedades $(dB_i)(dB_j) = \delta_{ij}\,dt$ y $(dB_i)(dt) = (dt)(dB_i) = 0$. Donde δ_{ij} es la Delta de Kronecker.

3.1.3 Generador de una Difusión de Itô

El operador diferencial parcial que describe la fórmula del generador de una difusión de Itô es crucial para derivar la ecuación de Fokker-Planck a partir de una difusión de Itô.

Definición 19. *Sea X_t una difusión de Itô, diremos que el Generador (infinitesimal) de X_t es A si:*

$$Af(x) = \lim_{t \downarrow 0}\frac{\mathbb{E}^x\big[f(X_t)\big] - f(x)}{t}, \tag{3.5}$$

donde $\mathbb{E}^x$ es la esperanza según P^x, con $P^x(X_0 = x) = 1$, es decir donde P^x es la medida de probabilidad tal que la difusión X_t comienza en x. Se denota por D_A al conjunto de funciones $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ con límite (3.5) $\forall x \in \mathbb{R}^n$.

La fórmula del generador de una difusión de Itô se obtiene como corolario de la fórmula de Itô (3.4). Para esbozar la prueba del enunciado anterior consideremos nuevamente la notación con respecto a los índices de la fórmula de Itô para dimensión arbitraria, de manera que los subíndices de X y B indexan coordenadas espaciales y no pasos temporales.

Sea X_t^x es un proceso de Itô ($X_0^x = x$), en un espacio de probabilidad filtrado $\big(\Omega, \Sigma, (\Sigma_t)_{t\geq 0}, P\big)$, dado por:

$$X_t^x(\omega) = x + \int_0^t \alpha(s,\omega)\,ds + \int_0^t \beta(s,\omega)\,dB_s,$$

donde B_t es n-dimensional. Para $f \in C_0^{1,2}$ es decir $f \in C^{1,2}$ con soporte compacto y τ un tiempo de paro para $\{\Sigma_t^{(n)}\}$ tal que $\mathbb{E}^x[\tau] < \infty$. Donde $\mathbb{E}^x$ es la esperanza según una medida $\mathbb{R}^x$ para X_t que comienza en x tal que:

$$\mathbb{R}^x\big[X_{t_1} \in \Sigma_1, \ldots, X_{t_k} \in \Sigma_k\big] = \mathbb{P}^0\big[X_{t_1}^x \in \Sigma_1, \ldots, X_{t_k}^x \in \Sigma_k\big], \quad \text{con } \Sigma_i \text{ Borel medibles.}$$

Consideremos también a $\alpha(t,\omega)$ y $\beta(t,\omega)$ acotadas en el conjunto de parejas (t,ω) de tal manera que $X(t,\omega)$ pertenece al soporte de f y $Y = f(X)$.

Sea $Y = f(X)$, por la fórmula de Itô (3.4) tenemos que:

$$dY = \sum_i \alpha_i \frac{\partial f}{\partial x_i} dt + \frac{1}{2}\sum_{i,j} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(\beta dB)_i(\beta dB)_j + \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i}(\beta dB)_i.$$

Considerando que $(\beta dB)_i(\beta dB)_j = (\beta\beta^T)_{i,j}dt$, se tiene $\frac{1}{2}\sum_{i,j}\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(\beta dB)_i(\beta dB)_j = \frac{1}{2}\sum_{i,j}(\beta\beta^T)_{ij}\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}dt$, entonces:

$$f(X_t) = f(x) + \int_0^t \Big(\sum_i \alpha_i \frac{\partial f}{\partial x_i} dt + \frac{1}{2}\sum_{i,j}(\beta\beta^T)_{ij}\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}\Big)ds + \sum_{ik}\int_0^t \beta_{ik}\frac{\partial f}{\partial x_i}dB_k.$$

Además la esperanza (de una variable aleatoria) es lineal y como $\mathbb{E}^x[f(x)] = f(x)$, se tiene que:

$$\mathbb{E}^x[f(X_\tau)] = f(x) + \mathbb{E}^x\Big[\int_0^t \Big(\sum_i \alpha_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + \frac{1}{2}\sum_{i,j}(\beta\beta^T)_{i,j}\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(X_s)\Big)ds\Big] + \sum_{ik}\mathbb{E}^x\Big[\int_0^t \beta_{ik}\frac{\partial f}{\partial x_i}dB_k\Big].$$

Finalmente, por cálculo estocástico, dado que f es acotada se tiene que $\mathbb{E}^x\big[\int_0^t \beta_{ik}\frac{\partial f}{\partial x_i}dB_k\big] = 0$, por lo tanto:

$$\mathbb{E}^x[f(X_\tau)] = f(x) + \mathbb{E}^x\Big[\int_0^\tau \Big(\sum_i \alpha_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + \frac{1}{2}\sum_{i,j}(\beta\beta^T)_{i,j}\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(X_s)\Big)ds\Big] \tag{3.6}$$

La expresión anterior (3.6) corresponde a la fórmula del generador de una difusión de Itô. Entonces para $f \in C_0^{1,2}$, por (3.6) y (3.5), podemos concluir que $f \in D_A$, más aún:

$$Af(x) = \sum_i \alpha_i(x)\frac{\partial f}{\partial x_i} + \frac{1}{2}\sum_{i,j}(\beta\beta^T)_{ij}(x)\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}. \tag{3.7}$$

En notación de operadores diferenciales:

$$A = \alpha(x)\cdot\nabla + \frac{1}{2}(\beta\beta^T)H^2, \tag{3.8}$$

donde H^2 es la matriz hessiana y ∇ es el gradiente.

3.1.4 Las Ecuaciones de Kolmogorov

Hannes Risken plantea un caso especial de la ecuación de Fokker-Planck (ecuación de *Smoluchowski*) para estudiar la evolución en el tiempo de la función de densidad de probabilidad (f) de una partícula sobre la cual actúan fuerzas de arrastre y fuerzas aleatorias [30, Capítulo 1].

Es importante destacar que no se han dado restricciones sobre las funciones $f \in C_0^{1,2}$ que pertenecen al conjunto D_A. Es necesario distinguir las condiciones para las cuales el generador de una difusión de Itô tiene como fórmula una ecuación de Fokker-Planck y cuando la fórmula es de la forma (3.8).

El teorema de la Ecuación *Backward* de Kolmogorov (*Kolmogorov's Backward Equation*) es a grandes rasgos el puente entre las SDEs y las PDEs, a continuación se plantean dos ecuaciones de Kolmogorov.

Si $f \in C_0^{1,2}$ entonces para $u(x,t) = \mathbb{E}^x[f(X_t)]$ se tiene que $u(\cdot,t) \in D_A$ para cada t y más aún:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = Au, \qquad t > 0, \quad x \in \mathbb{R}^n, \tag{3.9}$$

$$u(0,x) = f(x), \quad x \in \mathbb{R}^n.$$

Donde (3.9) es la Ecuación *Backward* de Kolmogorov:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sum_i \alpha_i \frac{\partial u}{\partial x_i} + \frac{1}{2}\sum_{i,j}(\beta\beta^T)_{ij}\frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j}.$$

Esta ecuación es muy parecida a la ecuación de Fokker-Planck, sin embargo se debe hacer la restricción que se tiene en la ecuación que plantea Risken: si se considera que la medida de transición de probabilidad de X_t tiene una densidad de probabilidad $u(x,t)$, surge otra versión de la ecuación de Kolmogorov.

Antes de derivar la ecuación de Fokker-Planck (*Kolmogorov's Forward Equation*) es importante resaltar que de (3.6) y (3.7) se obtiene la fórmula de Dynkin (3.10), este resultado afirma

que para $f \in C_0^{1,2}$ y τ un tiempo final tal que $\mathbb{E}^x[\tau] < \infty$, si A es el generador de un proceso X_t se cumple que:

$$\mathbb{E}^x[f(X_\tau)] = f(x) + \mathbb{E}^x\Big[\int_0^\tau Af(X_s)\,ds\Big] \,. \tag{3.10}$$

Estos resultados son suficientes para hacer la derivación de la ecuación de Fokker-Planck.

Sea X_t una difusión de Itô en $\mathbb{R}^n$ tal que la densidad de probabilidad de transición de X_t es $u(x,t)$, es decir:

$$\mathbb{E}^x\big[f(X_t)\big] = \int_{\mathbb{R}^n} f(y)u_t(x,y)dy \quad \forall f \in C_0^2 \,,$$

donde el generador de X_t es:

$$Af(y) = \sum_i \alpha(y)\frac{\partial f}{\partial x_i} + \frac{1}{2}\sum_{i,j}(\beta\beta^T)_{ij}(y)\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \qquad f \in C_0^2.$$

Si asumimos que $u_t(t,x)$ es suave (continuamente diferenciable) para cada t,x entonces $u_t(t,x)$ satisface otra ecuación de Kolmogorov, la Ecuación *Forward* de Kolmogorov (*Kolmogorov's Forward Equation*):

$$\frac{d}{dt}u_t(x,y) = A_x^* u_t(x,y) \qquad \forall x,y,$$

donde A_x^* es el operador adjunto de A_x bajo el producto interior usual de $L^2(dy)$, es decir, $\langle \phi,\psi\rangle = \int \phi\overline{\psi}d\lambda$ y $\langle A\phi,\psi\rangle = \langle \phi, A^*\psi\rangle$.

Como $u_t(t,x)$ es una función de densidad:

$$\mathbb{E}^{x_0}\big[f(X_t)\big] = \int_{\mathbb{R}^n} f(y)u_t(x,y)dy\,ds \;, \quad f \in C_0^2 \,.$$

[32, Capítulo 8] Por la fórmula de Dynkin (3.10) sabemos que:

$$\mathbb{E}^{x_0}\big[f(X_t)\big] = f(x_0) + \int_0^t \int_{\mathbb{R}^n} A_y f(y)u_s(x,y)dy\,ds \;, \quad f \in C_0^2 \,.$$

Derivando con respecto a t:

$$\int_{\mathbb{R}^n} f(y)\frac{\partial u_t(y)}{\partial t}dy = \int_{\mathbb{R}^n} u_t(y)A_y f(y)dy = \int_{\mathbb{R}^n} A_y^* u_t(y)f(y)dy \;, \quad f \in C_0^2 \,.$$

Dado que f es arbitraria en C_0^2, podemos concluir que efectivamente:

$$\frac{\partial u_t(t,x)}{\partial t} = A_x^* u_t(t,x) \,. \tag{3.11}$$

Sabemos además que A es un operador diferencial parcial (lineal) en el espacio L^2, por lo cual satisface la fórmula para adjuntos formales:

$$\text{si} \quad Lu = \sum_i g_i(x) D^i u \quad \text{entonces} \quad L^* = \sum_i (-1)^i D^i (\overline{g_i(x)} u) \ . \tag{3.12}$$

En otras palabras por (3.11) y (3.12), podemos concluir que:

$$\frac{\partial u_t(t,x)}{\partial t} = -\sum_i \frac{\partial}{\partial x_i}\big(\alpha_i u\big) + \frac{1}{2}\sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}\big((\beta\beta^T)_{ij} u\big) \ ,$$

lo cual se puede escribir como:

$$A^* \cdot = \nabla \cdot \big(- \alpha(x) \cdot + \frac{1}{2} \nabla \cdot (\beta\beta^T) \cdot \big) \ . \tag{3.13}$$

3.2 La Ecuación de Fokker-Planck

[30, Capítulo 1]La ecuación general de Fokker-Planck es:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\sum_i \frac{\partial}{\partial x_i}\big(\alpha_i u\big) + \frac{1}{2}\sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}\big((\beta\beta^T)_{ij} u\big),$$

el lado derecho de la igualdad es la fórmula del generador de una difusión de Itô.

Un ejemplo de la ecuación de Fokker-Planck es (3.14) que describe la evolución temporal de la función de densidad de probabilidad de la posición de una partícula que se mueve de manera browniana, esta es una PDE [6, Capítulo 2]:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \gamma \frac{\partial v u}{\partial v} + \gamma \frac{kQ}{m} \frac{\partial^2 u}{\partial v^2}, \tag{3.14}$$

esta es la ecuación de movimiento que describe la función de densidad de probabilidad $u(t,x)$ de una partícula pequeña de masa m inmersa en un fluido [30]. Donde la fuerza de fricción que actúa sobre la partícula es descrita por la ley de Stokes:

$$F_c = \alpha v,$$

donde v es la velocidad del movimiento de la partícula, t es el tiempo, k es la constante de Boltzmann, Q es la temperatura del fluido y $\gamma = \alpha/m$.

3.2.1 Fokker-Planck con Coeficientes Constantes

Al igual que en el caso de una SDE una ecuación de Fokker-Planck tiene dos términos, uno de arrastre y uno de difusión. Consideremos la ecuación de Fokker-Planck en una dimensión en donde ambos términos tienen coeficientes constantes:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -a\frac{\partial u}{\partial x} + b\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \tag{3.15}$$

donde el arrastre es $a \in \mathbb{R}$, la difusión es $b \in \mathbb{R}_+$ y $u(t,x)$ es la función de densidad de una difusión de Itô X_t, la ecuación (3.15) tiene una solución analítica [6, Capítulo 2]:

$$u(t,x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi bt}}\int_{-\infty}^{\infty} f(\xi)\exp\left(-\frac{(x+at-\xi)^2}{4bt}\right)d\xi, \tag{3.16}$$

para la cual se puede utilizar una condición inicial $u(0,x) = f(x)$ delta de Dirac, como aparece en la figura (3.1), dicha condición inicial $f(x) = \delta(x)$ se comporta:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(\xi - a)g(\xi)d\xi = g(a)$$

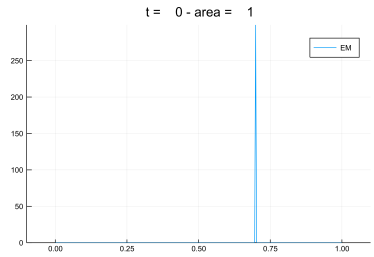

Figura 3.1: Condición inicial delta de Dirac

Utilizando esta función como condición inicial para la solución analítica de la ecuación de Fokker-Planck con coeficientes constantes (3.16) se obtiene la función de densidad de una distribución normal con parámetros $\mu = x_0 - (at)$ y $\sigma^2 = 2bt$:

$$u(t,x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi bt}}\int_{-\infty}^{\infty} \delta(\xi - x_0)\exp\left(-\frac{(x+at-\xi)^2}{4bt}\right)d\xi\ ,$$

$$u(t,x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi bt}}\exp\left(-\frac{(x+at-x_0)^2}{4bt}\right). \tag{3.17}$$

Las condiciones iniciales de tipo delta de Dirac son ideales para el análisis de las series de tiempo sin embargo no es posible utilizarlas en ambos métodos numéricos de manera directa, la solución numérica de las ecuaciones diferenciales parciales que se utiliza en esta tesis requiere de condiciones iniciales derivables.

Por otro lado, la ecuación de Fokker-Planck (3.15) es la fórmula del generador (3.13) de la ecuación estocástica cuyo término de arrastre es $\alpha(X_t) = -a$ y cuyo término de difusión es $\beta(X_t) = \beta^T(X_t) = \sqrt{2b}$:

$$A^* u(t,x) = \frac{1}{2}\left(\sqrt{2b}\right)^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - a\frac{\partial u}{\partial x}\ .$$

La función de densidad de probabilidad $u(t,x)$ que es descrita por la ecuación de Fokker-Planck con coeficientes constantes (3.15) es la función de densidad de probabilidad de la difusión de Itô X_t:

$$dX_t = \sqrt{2b}\, dB_t - a dt \qquad X(0) = X_0 \ . \tag{3.18}$$

A esta ecuación estocástica se le conoce como movimiento browniano con deriva (o movimiento browniano aritmético).

3.3 Fokker-Planck con Difusión Constante y su Aplicación

En esta tesis no se resuelve la versión general de la ecuación de Fokker-Planck, se considera un coeficiente de difusión constante $0 < b < 1$. También se considera un término de arrastre determinado por una función explícita $\alpha(X_t)$, en el caso lineal y constante.

Una versión particular de la ecuación de Fokker-Planck se puede utilizar para estudiar la probabilidad con la que el estado de una región del cerebro puede afectar a otras regiones en lapsos de tiempo dados.

Al resolver la ecuación de Fokker-Planck se obtiene la densidad de probabilidad de un proceso estocástico que en este caso es el proceso con el que se desea describir la actividad de las regiones. Por esta razón tiene sentido resolver la ecuación en la dimensión del número de regiones que se consideran, es decir, si se consideran D regiones del cerebro entonces la ecuación estocástica que cuyo generador es la ecuación de Fokker-Planck también es de dimensión D.

La ecuación estocástica con coeficiente de difusión constante y coeficiente de arrastre $-\alpha(X_t)$ es:

$$dX_t = -\alpha(X_t)dt + \sqrt{2b}\, dB_t \ . \tag{3.19}$$

La fórmula del generador (ecuación de Fokker-Planck) de la ecuación (3.19) es:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sum_i^D \frac{\partial \alpha_i(\boldsymbol{x})u}{\partial x_i} + b\sum_i^D \frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2}. \tag{3.20}$$

La ecuación de Fokker-Planck describe la evolución en el tiempo de una densidad de Itô, por ello comparten el mismo dominio espacial. Dada una condición inicial la ecuación describe cuanto se aleja, de que manera se desplaza y cuanto se difunde la densidad de probabilidad en el dominio de la misma.

Para una región del cerebro, cuya condición inicial es una función Delta de Dirac, el dominio de la ecuación son los posibles valores que puede tomar dicha región. De manera natural se utiliza el intervalo $[0,1]$ para parametrizar los estados de activación de las regiones. Por esta

razón la ecuación de Fokker-Planck determina el desplazamiento de dicha condición inicial en dicho intervalo:

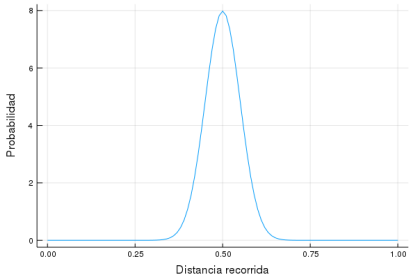

Figura 3.2: Dominio en una dimensión.

Para las series de tiempo rsfMRI la solución de la ecuación de Fokker-Planck, en un tiempo de paro dado y para una condición inicial dada, es la densidad de probabilidad conjunta de la actividad de las regiones. La solución describe la probabilidad de que la activación de las regiones: aumente, disminuya o permanezca igual.

En esta sección se discuten los parámetros y la manera de determinar la condición inicial de la ecuación de Fokker-Planck con la cual se analizan las series de tiempo rs-fMRI.

3.3.1 Dominio de la Ecuación

Por simplicidad se considera como dominio de la función al producto cartesiano del intervalo $[0,1]$ tantas veces como series de tiempo se consideran. Es decir si se analizan D regiones el dominio de la ecuación es el espacio $[0,1] \times ... \times [0,1]$ (D veces).

Por otro lado el dominio temporal puede variar un poco según el método numérico que se utilice, esto es porque las condiciones iniciales que requiere uno de los métodos numéricos no son compatibles con los datos de las series de tiempo. Es entonces que el intervalo del dominio de tiempo se considera simplemente como $[T_0, T]$, donde $0 \leq T_0$ es el tiempo inicial y $T > T_0$ es el tiempo de paro.

3.3.2 Coeficiente de Arrastre

Para la aplicación que motiva este trabajo es de gran utilidad considerar coeficientes de arrastre cuyo coeficiente sea el de una matriz, esta alternativa se implementó durante algunas simulaciones cuyos resultados no son necesarios para este trabajo. Es importante mencionar, como funciona dicha alternativa para su uso posterior en la aplicación considerada, aunque el coeficiente de los términos de arrastre lineales y no lineales considerados para las simulaciones relevantes para este trabajo son un escalar.

Con el uso de software de terceros es posible, para algunos datos de las fMRI, calcular series de tiempo asociadas con ciertas regiones en el cerebro (B). Con dichas series de tiempo es posible calcular una matriz de correlación que da lugar a un parámetro con el cual se puede interpretar la influencia que hay entre dichas regiones en el cerebro.

Para este modelo puede ser gran utilidad considerar dichas matrices por lo cual inicialmente la función $\alpha(X_t)$ se planteo considerando a la matriz de correlaciones de Pearson, A (2.2):

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & . & . & . & A_{1D} \\ & . & & & \\ & & A_{ij} & & \\ & & & . & \\ A_{D1} & . & . & . & A_{DD} \end{bmatrix},$$

donde $D \in \mathbb{N} - 0$ es precisamente la cantidad de regiones del cerebro que se consideran y la dimensión de la ecuación de Fokker-Planck que se desea aproximar. El valor de A_{ij} se puede obtener calculando la correlación de Pearson que hay entre las series de tiempo (Ts, *time series*) de la actividad de dos regiones cerebrales obtenidas a partir de una resonancia magnética funcional, es decir $A \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$:

$$A_{ij} = \frac{cov(Ts_i, Ts_j)}{\sigma_{Ts_i}\sigma_{Ts_j}},$$

donde las series de tiempo Ts corresponden a regiones del cerebro planteadas en el artículo *Functional network organization of the human brain* de Power [27]. La figura (3.3) ilustra la actividad de las regiones del cerebro y la correspondencia de las series de tiempo con dichas regiones.

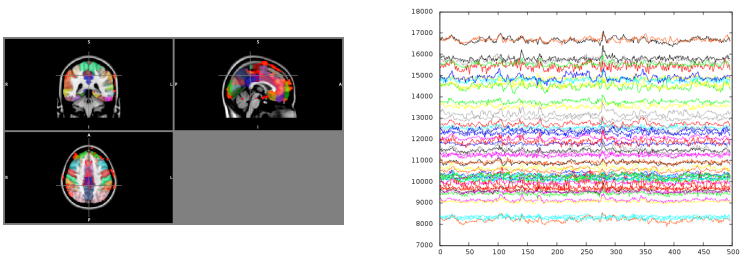

Figura 3.3: Series de tiempo rs-fcMRI

Los valores de la matriz A pertenecen intervalo $[-1, 1]$ debido a que la correlación de Pearson toma valores entre -1 y 1, donde 1 es muy correlacionado y -1 es inversamente correlacionado.

La correlación de dos variables aleatorias es la magnitud del cambio de una variable con respecto a la otra, es entonces que la matriz A juega un rol muy importante para definir el término

de arrastre de la ecuación de Fokker-Planck. En este trabajo se considera que la correlación entre las parejas de series de tiempo rsfMRI es precisamente la magnitud de la influencia que hay entre ellas.

Como se menciona al principio de la sección, para las simulaciones relevantes y por simplicidad se considera un coeficiente escalar para la función del término de arrastre $\alpha(X_t)$, (4.10).

3.3.3 Estados Iniciales

De la misma manera, la aplicación que se tiene en mente se beneficia de considerar un estado inicial del proceso estocástico que se pueda interpretar como la activación inicial de las regiones del cerebro visibles en las series de tiempo, dicho estado inicial puede ser un vector $\boldsymbol{X}_0$ de dimensión D:

$$\boldsymbol{X}_0 = (X_1(0), \ldots, X_D(0)).$$

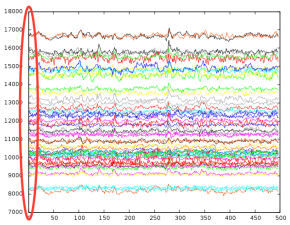

Figura 3.4: Condiciones iniciales

La evolución temporal de la densidad de probabilidad del proceso estocástico cuya posición inicial es el vector $\boldsymbol{X}_0$ está descrita por la ecuación de Fokker-Planck. Es posible visualizar dicha evolución como una caminata aleatoria descrita por la ecuación estocástica que gobierna a la ecuación de Fokker-Planck en el espacio de dimensión D. La evolución del proceso estocástico también se puede plantear como una colección de caminatas aleatorias en una sola dimensión, considerando a cada serie de tiempo rsfMRI como una coordenada del proceso estocástico. Esto no implica que son caminatas independientes, cuando la función $\alpha(X_t)$ del término de arrastre esta definida con el valor de más de una caminata, cada coordenada se verá influenciada por las demás coordenadas del proceso estocástico.

CAPÍTULO 4

MÉTODOS NUMÉRICOS

Dada la naturaleza de la aplicación que motiva a resolver la ecuación de Fokker-Planck es sensato buscar distintas alternativas para resolver dicha ecuación, de esta manera se pueden comparar las aproximaciones obtenidas con cada método y entender la información que presenta cada tipo de ecuación. Por un lado las ecuaciones estocásticas en esta tesis se aproximan por medio del método de Euler-Maruyama. Para las ecuaciones parciales se utiliza el método de Diferencias Finitas.

Las referencias principales para Diferencias Finitas fueron los libros de *Burden* [5, Capítulo 4] y *Leveque* [24, Capítulo 1] mientras que para Euler-Maruyama se utiliza el artículo de *Desmond* [16] entre otras fuentes como el libro de *Iacus* [18, Capítulo 2].

4.1 Dominios Numéricos de la Función

Para aproximar de manera numérica a la ecuación de Fokker-Planck y a su ecuación estocástica asociada se deben considerar un dominio espacial y temporal discretos. Para esta tesis el dominio espacial que se considera es el espacio $\prod_{i=1}^{D}[0,1]$ como se menciona en la sección (3.3.1). Para dimensión 1 esto es el intervalo $[0,1]$ el cual se hace discreto con una cantidad de pasos $N-1$, esto se describe con mayor detalle en la sección (4.2), de lo cual resulta un paso $\Delta x = \frac{1}{N-1}$.

De manera análoga el dominio temporal es un intervalo $[T_0, T]$, donde T es un tiempo de paro, T_0 es el tiempo inicial y donde el intervalo se hace discreto con un paso Δt. Dado que el intervalo del dominio temporal no es fijo como en el caso espacial, se define el tamaño de Δt dependiendo de cada simulación.

4.2 Diferencias Finitas

El método numérico de Diferencias Finitas en Dominio Temporal, FDTD (*Finite Difference Time Domain*), se utiliza para aproximar PDE's que evolucionan en el tiempo como la ecuación de Fokker-Planck. La idea general del método es hacer aproximaciones a las soluciones de las ecuaciones diferenciales usando la definición de derivada sin calcular el límite, es decir $u'(x) \simeq \frac{u(x-h)-u(x)}{h}$ para valores suficientemente pequeños de h.

Consideramos una función $u \in C^\infty$ (infinitas veces derivable), la serie de Taylor para dicha u alrededor de un punto x_i es:

$$u(x) = u(x_i) + \frac{(x-x_i)}{1!}\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{(x-x_i)^2}{2!}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \cdots + \frac{(x-x_i)^k}{k!}\frac{\partial^k u}{\partial x^k} + \cdots .$$

Para $\Delta x = x - x_i$:

$$u(x_i+\Delta x) = u(x_i) + \frac{(\Delta x)}{1!}\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2!}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \cdots + \frac{(\Delta x)^k}{k!}\frac{\partial^k u}{\partial x^k} + \mathrm{R}_{k+1} ,$$

donde R_{k+1} es un residuo, o la suma infinita después del término k-ésimo. Sin pérdida de generalidad podemos utilizar el residuo a partir del tercer término que en este caso es de segundo grado:

$$u(x_i+\Delta x) = u(x_i) + (\Delta x)\frac{\partial u}{\partial x} + \mathrm{R}_2 , \tag{4.1}$$

Despejando a $\frac{\partial u}{\partial x}$ de (4.1) obtenemos:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u(x_i+\Delta x) - u(x_i)}{\Delta x} - \frac{\mathrm{R}_2}{\Delta x} . \tag{4.2}$$

Llamaremos Error Local de Truncamiento, LTE (*Local Truncation Error*), al residuo que se obtiene al tomar los términos que se van a considerar en la aproximación de la derivada con la serie de Taylor. Dicho error tiene un orden que depende del término a partir del cual se trunca la serie y al orden del error se le denota como $O(\cdot)$ (notación O grande, *big-O*) que se puede interpretar como el grado del residuo. Este error decrece cuando Δx decrece, pues para valores cada vez más pequeños de Δx el residuo o la serie restante convergen a cero.

Para la ecuación (4.2) el LTE es:

$$\frac{\mathrm{R}_2}{\Delta x} = \frac{\frac{(\Delta x)^2}{2!}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \cdots + \frac{(\Delta x)^k}{k!}\frac{\partial^k u}{\partial x^k} + \cdots}{\Delta x} = \frac{\Delta x}{2!}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \cdots + \frac{(\Delta x)^{k-1}}{k!}\frac{\partial^k u}{\partial x^k} + \cdots ,$$

es decir, que el orden del error es $O(\Delta x)$, ya que el término de menor grado es lineal y este es el mayor término en la suma del residuo. Considerando esto podemos escribir a (4.2) como:

$$\frac{\partial u}{\partial x} - O(\Delta x) = \frac{u(x_i+\Delta x) - u(x_i)}{\Delta x} , \tag{4.3}$$

en donde $O(\Delta x)$ determina el orden del grado del LTE. Una notación más simple es:

$$u' - O(\Delta x) = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} \ ,$$

a este método se le conoce como Diferencias Finitas hacia adelante de primer orden, de dimensión 1. Por otro lado, es posible obtener Diferencias Finitas hacia atrás y centrales de primer orden y de dimensión 1, respectivamente:

$$u' - O(\Delta x) = \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} \qquad \text{y} \qquad u' - O(\Delta x) = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{\Delta x}.$$

Las Diferencias Finitas hacia adelante surgen de utilizar la sustitución $\Delta x = x_i - x$ (en el paso (4.1)) y las diferencias centrales son el promedio de las diferencias hacia adelante y hacia atrás, por lo cual también tienen un LTE de primer orden. Estas variaciones del método ayudan a mejorar la precisión o en general se utilizan según los valores que se buscan calcular con este método.

Por otro lado, haciendo discreto al dominio temporal y al dominio espacial se logra aproximar cada término en una ecuación diferencial (en dimensión 1). Podemos pensar a los valores de una función u con dominio $[0,y] \times [0,T] \subset \mathbb{R}^2$ como un arreglo en un eje espacial que cambia con cada paso temporal, diremos que los nodos son los valores de u ordenados en dicho eje espacial discreto con pasos de tamaño Δx y estos evolucionan en el tiempo con pasos Δt.

Estos pasos temporal y espacial se calculan haciendo discretos al dominio espacial y al intervalo de tiempo en los que nos interesa evolucionar la función, es decir, se dividen entre N_1 y N_2 al dominio espacial y al intervalo de tiempo respectivamente. Por ejemplo en los intervalos $[0,1]$ y $[0,T]$ los pasos espacial y temporal serían $x_j = j\Delta x$ y $t_n = n\Delta t$:

$$0 = t_0, t_1, t_2, \ldots, t_{N_2-1}, t_{N_2} = T \ ,$$

$$0 = x_0, x_1, x_2, \ldots, x_{N_1-1}, x_{N_1} = 1 \ ,$$

donde $u_j^n = u(t_n, x_j)$, con $\Delta x = \frac{1}{N_1}$ y $\Delta t = \frac{T}{N_2}$. Esto define una malla que hace discreta a la ecuación, en el caso de dimensión 1 la malla u_j^n es un arreglo (vector) cuyas entradas son los valores de la ecuación a lo largo de su dominio discreto, la figura (4.1) es una representación de la evolución de un paso temporal de dicha malla considerando diferencias finitas centrales:

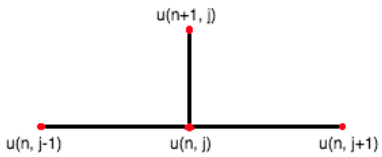

Figura 4.1: Malla de dimensión 1 para FDTD centrales.

Este planteamiento se beneficia de utilizar a su vez una malla del dominio espacial y una malla del dominio temporal, la malla del dominio espacial es de espacial interés para generalizar el método de FDTD a dimensión mayor.

Por otro lado es de especial interés hacer notar que la magnitud del orden del LTE varía de acuerdo a la escala del orden de magnitud de los pasos Δx y Δt. En otras palabras, con un refinamiento fino de la malla que hace discreto al dominio espacial y un refinamiento fino de la malla temporal del dominio de la función se puede hacer tan pequeño al error como se desee, cabe mencionar que a menor error mayor costo de computo.

4.2.1 Diferencias Finitas de Segundo Orden

De manera similar se pueden calcular las derivadas de mayor orden, por ejemplo para la segunda derivada las FDTD centrales en dimensión 1 son:

$$u'' - O(\Delta x^2) = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} \ .$$

Si se tienen ambos términos dentro de una misma ecuación se considera que el orden del error de la ecuación es el orden más bajo, que implica una cantidad mayor de términos que no se utilizan después de hacer el truncamiento, esto es porque la notación *big-O* considera al orden del peor escenario posible (el mayor error). Para la ecuación de Fokker-Planck el error es de orden lineal.

4.2.2 Un Algoritmo de Condiciones de Frontera para Diferencias Finitas

El método de Diferencias Finitas no considera condiciones de frontera de manera nativa, es decir los nodos inicial y final de nuestra solución numérica se deben calcular de manera separada si se desea incluir algún tipo de condiciones de frontera. Cuando la ecuación que se quiere describir es una densidad de probabilidad se debe considerar que no puede haber perdida de área bajo la curva de dicha función, es decir, para funciones de densidad se requieren condiciones de frontera conservativas.

El siguiente algoritmo genera condiciones de frontera conservativas.

Sea u un arreglo de tamaño N

u_1	u_2	u_3	...	u_{N-2}	u_{N-1}	u_N

Paso 1: Sumar la posición 2 a la posición 3 y la posición u_{N-1} a la posición u_{N-2}. Esto tiene el fin de recorrer el área cerca de los extremos una posición hacia el centro:

u_1	u_2	u_3+u_2	u_4	...	u_{N-3}	$u_{N-2}+u_{N-1}$	u_{N-1}	u_N

Paso 2: Igualar las posiciones adyacentes a los extremos a cero, esto es con el fin de restar el área duplicada en el paso anterior:

u_1	0	u_3	...	u_{N-2}	0	u_N

Paso 3: Diferencias Finitas en dimensión 1, expresión 4.6.

Paso 4: Igualar los extremos a cero:

0	u_2	u_3	...	u_{N-2}	u_{N-1}	0

Este último paso indica que algoritmo es una condición de frontera de Dirichlet pues asignamos un valor (cero) a los nodos extremos de la solución.

4.2.3 Fokker-Planck en FDTD

Consideremos la ecuación de Fokker-Planck de dimensión 1:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial \alpha(x)u}{\partial x} + b\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \ ,$$

para esta ecuación desarrollando cada término con FDTD se tiene:

$$\frac{u_i^{n+1}-u_i^n}{\Delta t} + O(\Delta t) = \left(\frac{\alpha_{i+1}u_{i+1}^n - \alpha_{i-1}u_{i-1}^n}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)\right) + b\left(\frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)\right) \ ,$$

donde el índice i corre sobre el dominio discreto espacial y donde el índice n corre sobre el dominio discreto temporal. Para simplificar términos aquí se considera que la malla que hace discreto a la función u es la misma que hace discreto al dominio de la función α, así el orden del error es el mismo para ambas funciones y por propiedades de *big-O* se puede considerar únicamente al LTE de una de las funciones. Despejando tenemos:

$$\frac{u_i^{n+1}-u_i^n}{\Delta t} = \frac{\alpha_{i+1}u_{i+1}^n - \alpha_{i-1}u_{i-1}^n}{2\Delta x} + b\frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2) + O(\Delta x^2) + O(\Delta t) \ , \tag{4.4}$$

por propiedades de *big-O* el signo del orden del error no cambia.

En los métodos por FDTD se debe cumplir la condición de *Courant-Friedrichs-Lewy* (CFL). Esta condición describe el grado de libertad con el cual pueden variar los tamaños de los pasos que hacen discretos a los dominios de la ecuación que se desea aproximar por FDTD. En la ecuación (4.4) esto implica que el valor de Δx y el de Δt no pueden ser muy distintos.

Esta condición de manera explícita indica que:

$$C = \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq C_{\max} \ .$$

donde C es el número de Courant y $C_{\max}$ depende de la discretización del dominio de la ecuación. En particular, para $C = 1$ se tiene que $\Delta x = \Delta t$, lo cuál simplifica la discretización y análisis del orden del error de aproximación del método.

Considerando $\Delta x = \Delta t$, en la ecuación (4.4), se obtiene por las propiedades de *big-O* un esquema numérico de primer orden:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \frac{\alpha_{i+1} u_{i+1}^n - \alpha_{i-1} u_{i-1}^n}{2\Delta x} + b \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} + O(\Delta t).$$

Para Δt suficientemente pequeño el error local de truncamiento se acerca a cero y se puede considerar la siguiente expresión para aproximar a la ecuación de Fokker-Planck:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \frac{\alpha_{i+1} u_{i+1}^n - \alpha_{i-1} u_{i-1}^n}{2\Delta x} + b \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2}. \tag{4.5}$$

Notemos que en la expresión (4.5), el primer término (que esta a la izquierda de la igualdad) se aproximó con FDTD hacia adelante, sin embargo tanto el segundo término (el término de arrastre) que es una primera derivada como el tercero (el termino de difusión) que es una derivada de segundo orden, están aproximados con FDTD centrales.

Al despejar a u_i^{n+1} en (4.5) obtenemos:

$$u_i^{n+1} = \Delta t \left(\frac{\alpha_{i+1} u_{i+1}^n - \alpha_{i-1} u_{i-1}^n}{2\Delta x} + b \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} \right) + u_i^n \ . \tag{4.6}$$

Esta expresión (4.6) corresponde a la ecuación de Fokker-Planck con coeficiente de difusión constante en dimensión 1, sin embargo para utilizarla se requiere de una malla que determine el valor de cada α_i. El campo vectorial dado por la función $\alpha(x)$ se plantea con detalle en la sección (4.3.1) y con dicho campo se puede definir tal malla.

Para el caso particular donde el término de arrastre también es constante y considerando una condición inicial dada por una distribución normal, se espera que la expresión (4.6) evolucione temporalmente también como una curva normal, que se desplaza de acuerdo al campo vectorial dado por la constante $\alpha(x) = a$. Esto debido a que la solución analítica (3.16) de la ecuación (3.15) para una condición inicial delta de Dirac, es una función de densidad de una distribución normal con parámetros $\mu = x_0 - at$ y $\sigma^2 = 2bt$.

4.2.4 División Dimensional

El método de Diferencias Fintas se puede generalizar a dimensión alta utilizando DS (*Dimensional Splitting*), para el cual se considera al dominio espacial como una malla de la dimensión de la ecuación a resolver y con ella se hace la aproximación de la solución [25]. La evolución temporal de la solución que se desea aproximar con la expresión por FDTD se simula utilizando dicha malla para representar los valores con los cuales se aproximan las derivadas de los términos de una ecuación, en este caso la de Fokker-Planck.

Un caso de especial interés para esta tesis es el de DS en dimensión 2, este método sirve para derivar con respecto a dos variables (espaciales) en lugar de una. Por esta razón se tienen dos pasos que hacen discreto al dominio espacial Δx y Δy, estos valores sirven de apoyo para recorrer la malla discreta de la ecuación.

Por ejemplo, la expresión (4.7):

$$u_{i,j}^{n+1}=\Delta t\left(\frac{\alpha_{i+1}u_{i+1}^{n}-\alpha_{i+1}u_{i-1}^{n}}{2\Delta x}+b\frac{u_{i+1}^{n}-2u_{i}^{n}+u_{i-1}^{n}}{\Delta x^2}\right)+\Delta t\left(\frac{\alpha_{j+1}u_{j+1}^{n}-\alpha_{j+1}u_{j-1}^{n}}{2\Delta y}+b\frac{u_{j+1}^{n}-2u_{j}^{n}+u_{j-1}^{n}}{\Delta y^2}\right)+u_{i,j}^{n}\ , \tag{4.7}$$

que resulta de desarrollar la ecuación de Fokker-Planck de dimensión 2 en el esquema (4.5), se puede simplificar tomando:

$$u^{*}=\Delta t\left(\frac{\alpha_{j+1}u_{j+1}^{n}-\alpha_{j+1}u_{j-1}^{n}}{2\Delta y}+b\frac{u_{j+1}^{n}-2u_{j}^{n}+u_{j-1}^{n}}{\Delta y^2}\right)+u_{i,j}^{n}\ , \tag{4.8}$$

y sustituyendo a (4.8) en (4.7):

$$u_{i,j}^{n+1}=\Delta t\left(\frac{\alpha_{i+1}u_{i+1}^{n}-\alpha_{i+1}u_{i-1}^{n}}{2\Delta x}+b\frac{u_{i+1}^{n}-2u_{i}^{n}+u_{i-1}^{n}}{\Delta x^2}\right)+u^{*}\ , \tag{4.9}$$

se obtiene la expresión de FDTD para la ecuación de Fokker-Planck en segunda dimensión.

La expresión (4.9) se puede aplicar en cada renglón y columna de una malla de dimensión 2 utilizando los pasos Δx y Δy, con el fin de calcular cada derivada parcial. Tales recorridos se hacen en dos sentidos (perpendiculares), como se muestra en la siguiente figura:

↓	↓	...	↓	↓
↓	↓	...	↓	↓
↓	↓	...	↓	↓
↓	↓	...	↓	↓
↓	↓	...	↓	↓

Figura 4.2: Malla 2D, Δx

→	→	→	→
→	→	→	→
⋮	⋮	⋮	⋮
→	→	→	→
→	→	→	→

Figura 4.3: Malla 2D, Δy

Figura 4.4: Mallas del dominio espacial, FDTD con DS 2D

En otras palabras, para aplicar Diferencias Finitas a esta malla se puede iterar utilizando el método FDTD para 1D en cada renglón y columna de la malla, a modo de obtener la derivada total. Para ello el primer recorrido que se hace con la expresión (4.8) es la primer derivada y con esta se obtienen los valores con los cuales se calculará la derivada total.

Por otro lado, es claro por las propiedades de *big-O* que la expresión (4.7) tiene un error de orden lineal, ya que es la suma de dos expresiones cuyo error es lineal como ocurre en la expresión (4.4).

De manera análoga en dimensión 3 se considera una malla cúbica en la cual se harán $3N$ recorridos dobles, esto es porque cada nivel de la malla es como una superficie de dimensión 2 que requiere de 2 recorridos y hay N superficies en cada uno de las tres direcciones. Si la malla fuera de $N \times N \times N$ se utilizaría el método de FDTD de dimensión 1 un total de $3N^2$ veces por paso temporal.

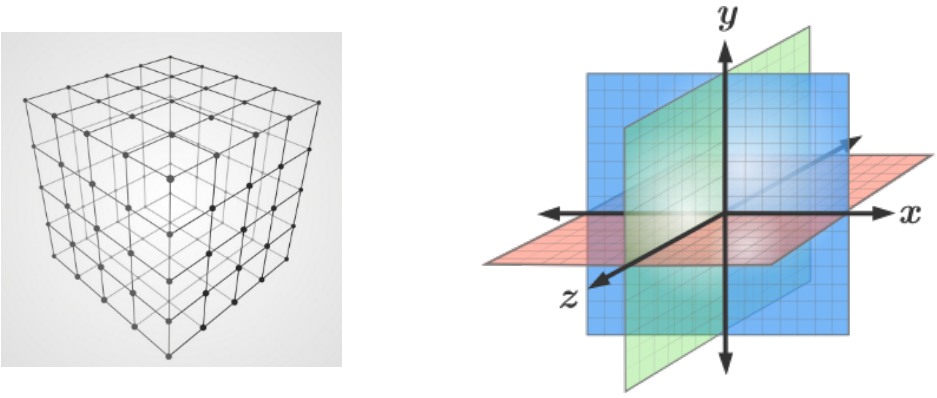

Figura 4.5: Malla 3D y planos 2D

En general se puede pensar a la malla como un hipercubo de manera que se deberá recorrer $D(N^{D-1})$ veces con el método de dimensión 1. Esto es un problema pues computacionalmente no será viable calcular la solución en dimensión muy alta utilizando FDTD.

4.3 Fokker-Planck con DS

Haciendo uso de DS se puede generalizar la solución por FDTD de la ecuación de Fokker-Planck para dimensión mayor. En el caso de dimensión 2 podemos apoyarnos en dos mallas de dominio espacial, esto para recorrer la malla principal (de u) en ambos sentidos perpendiculares y utilizar valores en cada malla del dominio espacial para determinar el valor de la función $\alpha(x)$ en cada nodo de la malla principal. Un ejemplo simple de esto es el de la ecuación de Fokker-Planck 1D con término de arrastre lineal, cuyo campo vectorial es simplemente el dominio espacial discreto multiplicado por un coeficiente de arrastre constante, es decir si el dominio espacial es:

x_1	x_2	...	x_{N-1}	x_N

,

entonces el campo vectorial para un coeficiente de arrastre lineal es:

a_1	a_2	...	a_{N-1}	a_N

,

donde $\alpha(x_i) = a_i$ para cada elemento de la malla del dominio espacial. De esta manera la malla de u recibe como parámetro los valores de la malla del campo vectorial y determina el valor de cada paso u_i^{n+1} según estos valores utilizando la expresión (4.6).

Esto se puede generalizar a dimensión 2 de manera simple utilizando DS y aplicando la función del término de arrastre a cada elemento de la malla del dominio espacial, si las mallas del dominio espacial en 2D son:

$x_1\ y_1$	$x_1\ y_2$	...	$x_1\ y_N$
$x_2\ y_1$	$x_2\ y_2$	...	$x_2\ y_N$
$\vdots$	$\vdots$	...	$\vdots$
$x_N\ y_1$	$x_N\ y_2$	...	$x_N\ y_N$

Figura 4.6: Mallas 2D del dominio espacial de la ecuación de Fokker-Planck

En donde los renglones de la primer malla y las columnas de la segunda malla son el dominio discreto de dimensión 1 y de tal manera que $x_i = y_i\ \forall i \in \{1, ..., N\}$. Apoyándose en estas mallas del dominio espacial es posible obtener las mallas que determinan al campo vectorial. La columna j-ésima de la malla del campo vectorial esta determinada por columnas de la función $\alpha(x)$ aplicada al dominio espacial de dimensión 1, estos valores sirven como parámetros a la columna j-ésima de la malla correspondiente a la función $u(x)$. Para cada columna o renglón de la malla del dominio espacial, se tiene una columna o renglón en la malla del campo vectorial:

$$\alpha\left(\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline x_1 & x_2 & ... & x_N \\ \hline\end{array}\right) \longrightarrow \begin{array}{|c|c|c|c|}\hline a_1 & a_2 & ... & a_N \\ \hline\end{array}$$

Para dimensión 2 esto es:

a_1	a_1	...	a_1
a_2	a_2	...	a_2
$\vdots$	$\vdots$	...	$\vdots$
a_N	a_N	...	a_N

a_1	a_2	...	a_N
a_1	a_2	...	a_N
$\vdots$	$\vdots$	...	$\vdots$
a_1	a_2	...	a_N

Figura 4.7: Mallas del campo vectorial para la ecuación de Fokker-Planck

Cabe mencionar que al tomar el eje x igual al eje y, las matrices de las mallas del campo vectorial únicamente se transponen. Pues como se discute para la figura (4.6), esto corresponde a cada recorrido en cada sentido.

Dado que DS consiste en aplicar el método de FDTD para dimensión 1 de manera iterativa sobre cada renglón y cada columna de la malla principal de la función $u(\boldsymbol{x})$, las mallas de la figura (4.7) funcionan como campo vectorial y determinan el valor que recibe la expresión (4.6) en cada una de estas iteraciones.

De la misma manera que se puede considerar $\Delta x = \Delta t$, se va a considerar para dimensión arbitraria que el paso que hace discreto al dominio espacial de la ecuación es para todas sus coordenadas Δt,

$$\Delta x_i = \Delta t \ ,$$

en particular para dimensión 2, $\Delta y = \Delta t$. De esta manera la convergencia del LTE se puede observar al reducir el tamaño de Δt, sin importar la dimensión de la ecuación.

En el ejemplo de dimensión 2 se recorre cada renglón y cada columna de la malla con los valores actuales de la ecuación utilizando la expresión (4.6). El primer recorrido constituye la derivada parcial con respecto a la primer variable, el segundo recorrido determina la derivada total y el valor final de u_{ij}^{n+1}.

Esto se puede generalizar a dimensión arbitraria utilizando las mallas del domino espacial que se obtienen al utilizar DS para obtener las mallas que determinan al campo vectorial de la función $\alpha(x)$. Esto se explica con más detalle en la sección (4.3.1).

4.3.1 Mallas del Término de Arrastre

Es importante hacer la distinción entre las funciones que recibe como parámetros una ecuación estocástica y la ecuación de Fokker-Planck correspondiente. Por un lado la ecuación estocástica recibe como coeficientes de arrastre y difusión funciones que dependen del proceso o difusión de Itô $\boldsymbol{X_t}$ que describen. Por el otro lado la ecuación de Fokker-Planck recibe como coeficiente de arrastre una función que depende de la variable independiente del dominio espacial $\boldsymbol{x}$. En otras palabras si $\boldsymbol{X_t}$ es una difusión de Itô tal que:

$$d\boldsymbol{X_t} = -\alpha(\boldsymbol{X_t})dt + \sqrt{2b}\,dB_t \ ,$$

entonces la función que recibe como parámetro el término de arrastre de la ecuación de Fokker-Planck correspondiente es $\alpha(\boldsymbol{X_t})$, donde $\boldsymbol{X}_t$ tiene una función de densidad:

$$F_{\boldsymbol{X_t}}(\boldsymbol{x}) = P(X_t^1 \leq x_1, X_t^2 \leq x_2, \ldots, X_t^n \leq x_n) \qquad F_{\boldsymbol{X_t}}(\boldsymbol{x}) = \int f_{X_t^1,\ldots,X_t^n}(x_1,\ldots,x_n)dx_1\ldots dx_n.$$

Es por esta razón que no se puede pasar de manera directa la función del coeficiente del término de arrastre de una versión de la ecuación a otra y en consecuencia no es directo pasar

de una función en el término de arrastre de una versión numérica a otra, para ello se debe considerar que ambos métodos numéricos requieren distintos tipos de parámetros. Por un lado la expresión de Euler-Maruyama es más flexible pues recibe como parámetro una versión explicita del coeficiente de arrastre, por otro lado la expresión del método por FDTD requiere de mallas con los valores que debe tomar en cada iteración.

Para pasar de la función $\alpha(\boldsymbol{X_t})$ correspondiente al método de E-M a las mallas que recibe como parámetros la versión de FDTD, primero consideramos que dado un dominio discreto en el método FDTD se tienen las mallas generadas del dominio espacial con DS. Estas mallas son todos los posibles valores que puede tomar el proceso $\boldsymbol{X_t}$. En otras palabras basta aplicar la función del término de arrastre a cada valor de dichas mallas, se debe tener en mente que una función $\alpha(\boldsymbol{x})$ también depende de las coordenadas del vector $\boldsymbol{x}$.

En dimensión 2 considerando las mallas del dominio espacial de la figura (4.6), podemos considerar al vector $x_{\text{pos}} = (x_1[k,l], x_2[k,l])$ donde x_1 y x_2 son las mallas del dominio espacial. Si las mallas del término de arrastre son a_1 y a_2 respectivamente están dadas por $a_1[k,l] = Ax_{\text{pos}}[1]$ y $a_2[k,l] = Ax_{\text{pos}}[2]$.

Un posible término de arrastre lineal, que puede ser de gran utilidad para la aplicación que motiva este trabajo es:

$$\alpha(X_t^i) = \sum_j A_{ij} X_t^j \ , \tag{4.10}$$

esta manera de implementar el coeficiente de arrastre para el método por FDTD consideran a la matriz A, que representa la información de las series de tiempo relevantes para esta aplicación. Sin embargo en la práctica se utiliza un término de arrastre más simple:

$$\alpha(X_t^i) = 0.2(X_t^i) \ .$$

4.4 Euler-Maruyama

El costo computacional de resolver ecuaciones con métodos numéricos es un factor importante que se debe considerar siempre que se desea resolver una ecuación en dimensión alta. Tal es el caso de la ecuación de Fokker-Planck que se utiliza en esta tesis, pues la dimensión de la ecuación que se desea resolver esta dada por el número de regiones del cerebro que se desean estudiar y estas pueden llegar a ser del orden de 264. Es por esta razón que a continuación se plantea un método alternativo para aproximar la ecuación de Fokker-Planck.

Al resolver una ecuación estocástica de manera analítica se obtiene un proceso estocástico gobernado por un movimiento browniano, el método de Euler-Maruyama (E-M) hace una aproximación de dicho proceso con caminatas aleatorias. En otras palabras el método de Euler-Maruyama permite aproximar la solución de una SDE sin necesidad de resolver la ecuación de manera analítica. Consideremos la difusión de Itô:

$$dX_t = \alpha(X_t)dt + \beta(X_t)dB_t, \qquad X(0) = X_0, \qquad t \in [0,T]. \tag{4.11}$$

El método de Euler-Maruyama consiste en hacer discreto al intervalo $[0,T]$ con pasos de tamaño Δt, tomando a $t_n = n\Delta t$ se hace la aproximación $X_n \approx X(t_n)$, para lograr esto el movimiento browniano B_t también se hace discreto. Dada la condición inicial o valor inicial de la SDE, X_0, la expresión de dicha SDE en el esquema de E-M será:

$$X_{t_n+1} = X_{t_n} + \alpha(X_{t_n})\Delta t + \beta(X_{t_n})\Delta B_{t_n}. \tag{4.12}$$

Los pasos de un movimiento browniano se distribuyen (16):

$$B_t - B_s \sim \mathrm{N}(0, t-s) = \sqrt{t-s}\ \mathrm{N}(0,1)\ ,$$

es decir, que ΔB_{t_n} en un contexto numérico se puede escribir como $\sqrt{\Delta t}\ \mathrm{N}(0,1)$, donde $\mathrm{N}(0,1)$ representa un numero aleatorio elegido con una distribución $\mathrm{N}(0,1)$ (Normal Estándar).

El método de Euler-Maruyama se puede utilizar para generar una cantidad $M \in \mathbb{N}$ de caminatas aleatorias que se mueven a lo largo del dominio espacial discreto de la ecuación, de manera que la expresión (4.12) debe estar indexada por caminata aleatoria:

$$X_{t_n+1}[m] = X_{t_n}[m] + \alpha(X_{t_n}[m])\Delta t + \beta(X_{t_n}[m])\Delta B_{t_n}\ .$$

Además, en los casos de las ecuaciones en dimensión alta se deben considerar más variables aleatorias que se hacen discretas de la misma manera, es decir, indexando con respecto a la dimensión:

$$X_{t_n+1}[d,m] = X_{t_n}[d,m] + \alpha(X_{t_n}[d,m])\Delta t + \beta(X_{t_n}[d,m])\Delta B_{t_n}\ . \tag{4.13}$$

Sin embargo la expresión (4.13) no brinda información acerca de la ecuación de Fokker-Planck correspondiente a la SDE aproximada por el método de E-M. Un histograma de las caminatas aleatorias determina como están distribuidos dichas caminatas en un tiempo t, de esta manera es posible aproximar la ecuación de Fokker-Planck.

Esta forma de aproximar a la ecuación de Fokker-Planck es de manera implícita un método de Monte Carlo. Este tipo de métodos son eficientes para dimensión alta sin embargo no son tan

precisos como otros métodos numéricos más costosos.

Se debe considerar que para mejorar la precisión de la aproximación que se hace con esta estrategia mejora cuando se toma una mayor cantidad de caminatas aleatorias, lo cual implica mayor costo computacional. Este análisis se hace en el capítulo (5).

4.4.1 Solución Analítica de una SDE

Para obtener la solución analítica X_t de una SDE se debe integrar de ambos lados de dicha ecuación diferencial estocástica en un intervalo de tiempo $[0,T]$:

$$\int_0^T dX_t = \int_0^T \alpha(X_t)\,dt + \int_0^T \beta(X_t)dB_t \ .$$

En esta tesis utilizamos E-M para aproximar las SDE's, sin embargo hay un caso de especial interés para esta tesis, es el de la SDE con coeficientes de los términos de arrastre y difusión constantes, tal ecuación estocástica es conocida como AMB *Arithmetic Brownian Motion*, para esta SDE la integral es:

$$\int_0^T dX_t = \int_0^T a\,dt + \int_0^T b\,dB_t \ ,$$

[28, Capítulo 4] de lo cual se tiene que:

$$X_t - X_0 = aT + bB_t \ ,$$

así como el método de E-M, para calcular X_n usa una aproximación numérica a los incrementos correspondientes a un movimiento browniano B(t), mediante un muestreo ponderado de una distribución normal estándar:

$$\Delta B = \sqrt{\Delta t}\ \mathrm{N}(0,1) \ ,$$

una suma acumulativa de estos incrementos, brinda una aproximación B_s al movimiento browniano:

$$B_s = \sum_0^s \sqrt{\Delta t}\ \mathrm{N}(0,1) \ . \tag{4.14}$$

Para hacer una simulación de una SDE se puede utilizar la ecuación (4.14), evaluada en $s = n$ correspondiente al tiempo T, es decir, $T = n\Delta t$. El valor B_n se sustituye en la solución analítica de la SDE, en este caso de la ecuación:

$$dX_t = a\,dt + b\,dB_t \ .$$

Con ello se aproxima la caminata aleatoria con arrastre y difusión constantes. Sin embargo esto se puede generalizar para cualquier SDE que cumpla las condiciones de existencia y unicidad

de solución. Se enfatiza que para que X_t sea la solución analítica correspondiente a X_n, ambos se deben calcular con la misma realización de B_s.

Cabe mencionar que la media de un ABM es:

$$\mathbb{E}[X_T] = \mathbb{E}[X_0 + aT + bB_t] = X_0 + aT + b\,\mathbb{E}[B_t],$$

sin embargo $\mathbb{E}[B_t] = 0$, por lo cual:

$$\mathbb{E}[X_T] = X_0 + aT$$

4.4.2 Fokker-Planck con Caminatas e Histogramas

Para generar las caminatas aleatorias que se deben cuantificar con el uso de histogramas primero se debe desarrollar la ecuación (3.19) en el esquema de Euler-Maruyama:

$$dX_t = \sqrt{2b}\,dB_t - \alpha(X_t)dt\ ,$$

de esta manera se obtiene la expresión:

$$X_{t_n+1}[d,m] = X_{t_n}[d,m] + \sqrt{2b}\,\Delta B_{t_n}[d,m] - \alpha(X_{t_n}[d,m])\Delta t\ ,$$

$$X_{t_n+1}[d,m] = X_{t_n}[d,m] + \sqrt{2b\Delta t}\ N(0,1) - \alpha(X_{t_n}[d,m])\Delta t\ . \tag{4.15}$$

Para aproximar la solución de la ecuación (3.19) cada caminata de cada coordenada del proceso estocástico debe seguir pasos descritos por (4.15).

Para aproximar la solución de la ecuación (3.20) se utilizan histogramas normalizados que cuantifican la frecuencia de las caminatas aleatorias generadas con la expresión (4.15) en un tiempo dado.

4.4.3 Cantidad de Bins en el Histograma

Considerando al dominio espacial discreto para las ecuaciones, se puede elegir una cantidad de bins para los histogramas que se utilizan en el método de Euler-Maruyama. Esto aunque es simple es importante ya que la aproximación mejora cuando el método de E-M con la estrategia de los histogramas considera la cantidad de bins adecuada.

La manera en la que se eligen en esta tesis los bins para dimensión 1, es utilizando el eje espacial discreto desplazado Δx hacia la izquierda y con un nuevo elemento al final, es decir si el eje espacial es:

x_1	x_2	...	x_{N-1}	x_N

,

entonces los bins están dados por:

$x_1 - \Delta x$	$x_2 - \Delta x$	...	$x_N - \Delta x$	$x_N + \Delta x$

.

De manera que los bins se toman cerrados por la derecha, es decir que las caminatas aleatorias se cuantifican según los intervalos $(x_i - \Delta x, x_{i+1} - \Delta x]$. Para extender esta noción a dimensión alta basta considerar el producto cartesiano de estos intervalos y el intervalo del dominio espacial.

4.5 Condiciones Iniciales en los Métodos Numéricos

Tanto la solución analítica como la aproximación con Euler-Maruyama pueden recibir condiciones iniciales Delta de Dirac, sin embargo el método por FDTD no puede recibir estas condiciones iniciales ya que al ser un método que aproxima derivadas requiere de condiciones derivables. Por esta razón se deben utilizar sábanas o superficies normales como condición inicial para el método por FDTD. Las sábanas son las gráficas de la densidad de probabilidad de una distribución normal en dimensión 2, cuya gráfica se muestra en la figura (**??**).

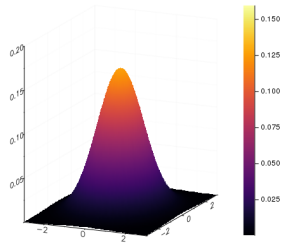

Figura 4.8: Sábana normal 2D vista en 3D.

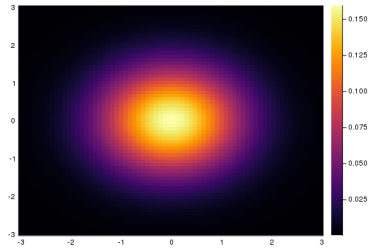

Figura 4.9: Sábana normal 2D vista en 2D.

Estas superficies se pueden visualizar de dos maneras, por conveniencia se suele utilizar una visualización en 2 dimensiones como mapas de calor (*heatmaps*) como la figura (**??**), este es el tipo de visualización que se hace en esta tesis.

Se puede generar una sábana o curva suave (derivable) utilizando una condición inicial en la solución analítica de la ecuación de Fokker-Planck. Dicha superficie será normal y suave por lo cual se puede utilizar como condición inicial para el método por FDTD.

Sin embargo para generar una muestra aleatoria que funcione como condición inicial para el método de Euler-Maruyama se debe acudir a herramientas estadísticas utilizando la media y la varianza de la superficie normal; dichas herramientas son accesibles de manera simple utilizando

las librerías de distintos lenguajes de programación.

Las muestras aleatorias generadas con una PDF utilizando esta estrategia sirven como condición inicial para el método de Euler-Maruyama, donde cada elemento de la muestra es una posición de las caminatas aleatorias.

Utilizar esta estrategia tiene como ventaja que se puede hacer la simulación de ambos métodos junto con la solución analítica y comparar las 3 superficies o sábanas. Estas condiciones iniciales adaptadas al método de Euler-Maruyama se pueden visualizar con histogramas 3D y de manera análoga a las sábanas se pueden graficar como curvas de nivel.

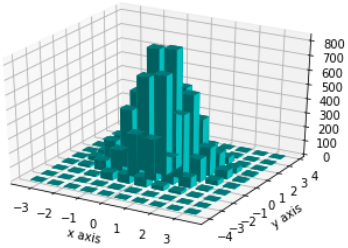

Figura 4.10: Histograma 2D visto en 3D.

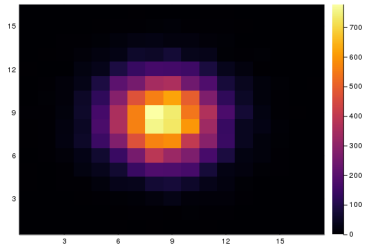

Figura 4.11: Histograma 2D visto en 2D.

Sin embargo únicamente se cuenta con la solución analítica en el caso de la ecuación con coeficiente de arrastre constante, por lo cual para hacer la comparación de los métodos numéricos en casos más generales se utilizan herramientas estadísticas-computacionales para generar superficies normales a partir de una media y una varianza dadas (de manera arbitraria). De esta manera se puede dar condiciones iniciales correspondientes a una PDF arbitraria al método de Euler-Maruyama.

Por otro lado, las condiciones iniciales del tipo Delta de Dirac en Euler-Maruyama son fáciles de implementar debido a que únicamente se requiere que todos las caminatas que serán descritos con E-M tengan el mismo valor inicial.

4.6 Errores de Aproximación

Ambos métodos numéricos permiten aproximar la solución de la ecuación de Fokker-Planck, para concluir esto se debe hacer un análisis del error de cada método numérico.

Por los teoremas de Kolmogorov vistos en la sección (3.1.4) sabemos que a un proceso estocástico descrito por una ecuación estocástica le corresponde una ecuación de Fokker-Planck y que

dicha ecuación describe la evolución temporal de la densidad de probabilidad del proceso estocástico. Es decir que se debe poder obtener la misma información con ambos tipos de ecuaciones diferenciales (estocástica y parcial).

Para un tiempo de paro T se hace la simulación con alguno de los métodos numéricos y se compara con la solución analítica en el caso de contar con ella. Cuando la solución analítica no se tiene se puede comparar contra el método numérico alternativo.

4.6.1 Error Relativo en FDTD

El error relativo consiste en medir la diferencia entre la solución analítica y la aproximación mediante un método numérico. En este caso se pueden utilizar normas para funciones y así determinar el parecido entre las soluciones numéricas y la solución analítica de la ecuación de Fokker-Planck.

Debido a la condición CFL por la cual en esta tesis se utiliza el mismo paso para hacer discreto al dominio espacial y al dominio temporal, en esta comparación se disminuye el tamaño del paso que hace discreto al dominio temporal. Lo cual resulta en el caso de FDTD en una malla de DS más fina y así en un LTE de menor orden, $O(\Delta x) = O(\Delta t)$.

La expresión para medir el error relativo de un método numérico es la siguiente:

$$\eta[u] = \left| \frac{u_{\text{ref}} - u}{u_{\text{ref}}} \right| , \tag{4.16}$$

donde u_{ref} es una referencia contra la cual se compara y u es una aproximación que se calcula con alguno de los métodos numéricos en el tiempo de paro T. En este trabajo se considera un tiempo de paro T tal que la distancia entre la media de la condición inicial y la media de la curva en el tiempo T está a 3 desviaciones estándar de distancia, como en la figura (4.12).

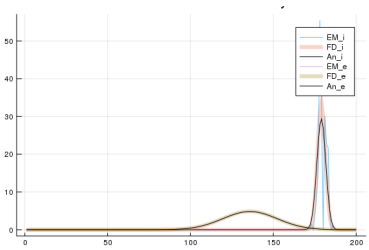

Figura 4.12: Distancia a la condición inicial.

Tras una evolución temporal cuando se han alejado las aproximaciones de la condición inicial, se debe medir la distancia entre las aproximaciones y la solución analítica. Para calcular esta

distancia utilizamos una métrica para funciones ya que las aproximaciones son discretizaciones de funciones medibles, la norma que se utiliza es la norma L^2:

$$||f||_2 = \left(\int |f(x)|^2 dx \right)^{1/2} ,$$

donde f es una función Lebesgue-medible.

Por otro lado es importante mencionar que es posible medir el error η del histograma que resulta de la solución obtenida por el método de E-M, usando como referencia la solución obtenida por el método FDTD. Este resultado es valioso, especialmente en los casos donde no se tiene una solución analítica. De la misma manera, es posible medir el error η del histograma que resulta de la solución obtenida por el método de E-M para el caso de arrastre constante. Esto se hace tomando como referencia la solución analítica.

Es muy importante destacar que el error que se mide con la expresión (4.16), η, representa la información correspondiente al LTE del método por FDTD. Se puede ver que η disminuye cuando el parecido entre la aproximación y la referencia aumenta, esto sucede en el método FDTD cuando el LTE disminuye, lo cual ocurre para un tamaño menor del paso Δt. Este análisis se hace en el capítulo (5).

4.6.2 Errores por Convergencia Débil y Fuerte en Euler-Maruyama

Medir el error de aproximación en el esquema de Euler-Maruyama es distinto a medir el error en FDTD, pues el método de E-M se utiliza para ecuaciones estocásticas y el método por FDTD aproxima ecuaciones diferenciales. Hay dos tipos de convergencia de interés al aproximar con Euler-Maruyama, la convergencia débil y la fuerte.

Teniendo en mente que X_n y $X(\tau_n)$ son variables aleatorias, donde $X(\tau_n)$ es una aproximación numérica de X_n, podemos pensar en términos de la esperanza de dichas variables para medir distancia y parecido en los estados que estas toman. Se dice que un método converge de manera débil con orden γ si existe una constante C tal que: [16]

$$\eta_w = |[\mathbb{E}(X_n)] - [\mathbb{E}(X(\tau))]| < C\Delta t^{\gamma} , \tag{4.17}$$

donde Δt es el tamaño del paso que hace discreto al dominio temporal de la ecuación. Diremos que la convergencia es fuerte si:

$$\eta_s = \mathbb{E}(|X_n - X(\tau)|) < C\Delta t^{\gamma} .$$

Usualmente se interpreta que la convergencia débil mide el error de la media y por otro lado que la convergencia fuerte mide la media del error. En esta tesis denotaremos al error fuerte

como η_s y al error débil como η_w.

Por otro lado decimos que un esquema converge con orden γ si al tomar al parámetro que refina al modelo k-veces más pequeño, entonces el error decrece en un factor k^γ, esto se explica detalladamente en la sección (4.7.3). Se puede demostrar de manera teórica que el método de Euler-Maruyama tiene una convergencia fuerte de orden $\gamma = 1/2$, también se puede demostrar que tiene una convergencia débil de orden $\gamma = 1$ [16]. En esta tesis no se da dicha demostración pero se hace un análisis de estos errores para ecuaciones estocásticas dadas.

Para garantizar que el orden de convergencia se pueda observar en los tipos de error que requieren de muestras aleatorias, como lo es el caso del error por convergencia débil y fuerte, los tamaños de las muestras con las cuales se miden estos errores deben ser suficientemente grandes; además de un paso Δt suficientemente pequeño. [16] Para una cantidad M de caminatas se tiene que los errores por muestras decaen con una razón de $1/\sqrt{M}$.

4.7 Errores Mixtos

Como se ha señalado en la sección (3.1.4), existe una relación bien establecida entre una difusión de Itô, y su correspondiente ecuación de Fokker-Planck. En las secciones previas, se han descrito métodos numéricos y criterios de evaluación del error para sus resultados, para una y otra. Sin embargo, estas herramientas, no permiten comparar los resultados de ambos métodos numéricos. Estas herramientas, no permiten valorar los resultados de ambos métodos numéricos bajo un mismo criterio, es decir, no aprovechan la relación mencionada entre ambas ecuaciones diferenciales.

En esta sección, se discutirá la posibilidad de aplicar criterios de evaluación de un método sobre el otro, aprovechando la relación mencionada. Con esto, como se ha dicho, se busca una herramienta que permita valorar un método en comparación al otro.

4.7.1 Error Relativo en Euler-Maruyama

Para poder analizar el error del método de Euler-Maruyama con η, el error que sirve para ecuaciones diferenciales parciales, se utilizan muestras de caminatas aleatorias en un tiempo de paro T generadas con dicho método y se utiliza un histograma para obtener la distribución del proceso estocástico descrito por la ecuación estocástica correspondiente, tal como se explica en la sección (2.2.2).

Es de suma importancia establecer la cantidad de caminatas y la cantidad de bins con los cuales se construye el histograma, pues para observar la convergencia clara del error relativo del

el método de Euler-Maruyama se requiere de una cantidad considerable de caminatas aleatorias lo cual puede resultar en un tiempo de ejecución ineficiente.

4.7.2 Error por Convergencia Débil en FDTD

El método por FDTD se utiliza para aproximar ecuaciones diferenciales parciales, por lo cual para poder medir la convergencia débil del método por FDTD se aproxima la solución en un tiempo de paro T y se mide la media de dicha distribución utilizando muestras aleatorias generadas con un algoritmo de muestreo. Hay distintos algoritmos para obtener muestras a partir de distribuciones arbitrarias para este trabajo se utilizó un muestreo por rechazo (*rejection sampling*), que consiste en generar números aleatorios distribuidos de manera uniforme (en la dimensión requerida), dichos números aleatorios se rechazan o aceptan para la muestra comparando con un valor en la distribución original.

Del mismo modo en que el tamaño de la muestra que se utiliza para calcular la media con la cual se mide el error débil para el método de E-M afecta al orden de convergencia, el tamaño de la muestra que se usa para FDTD determina el orden con el que converge el error débil para este método. Es decir, se requiere de una muestra de un tamaño suficientemente grande para observar el orden con el que converge dicho error.

Por otro lado, se considera que no es posible hacer una evaluación adecuada del error fuerte a partir de los resultados que ofrece el método FDTD. Esto se debe a que, como se describe en (4.6.2), el error fuerte, usa la diferencia de la posición final de dos expresiones correspondientes a la misma caminata aleatoria.

No es posible obtener esta información a partir de los resultados del método FDTD, porque representan una PDF, no se tiene información sobre caminatas aleatorias específicas. Se puede muestrear la PDF y se tendría la posición de una caminata aleatoria a este tiempo, luego, se puede muestrear la PDF que se tenga de referencia (por ejemplo la solución analítica de la ecuación de Fokker-Planck), con esto se tendrá otra posición de una caminata aleatoria, al mismo tiempo, pero no es posible hacerlo de una manera tal que ambas posiciones correspondan a la misma caminata.

En el caso del error débil la situación es diferente, porque la comparación se hace entre esperanzas. Es decir, muestreando la PDF que resulta del método FDTD, se puede obtener un conjunto de M posiciones $\{X_n^i\}$, de las cuales se calcula el promedio, y se toma como una aproximación a la esperanza:

$$\mathbb{E}(X_n) \simeq \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M} X_n^i \ .$$

Por otra parte, se realiza el mismo procedimiento con la PDF que se esté usando como referencia, y se toma su promedio como una aproximación a la esperanza:

$$\mathbb{E}(X(T)) \simeq \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M} X_{n,\mathrm{ref}}^i \ .$$

Usando estas dos aproximaciones se evalúa el error débil sustituyendo en la ecuación (4.17). Si el tamaño de la muestra M es suficientemente grande, se espera que las aproximaciones descritas no requieran que se calculen con las mismas realizaciones, es decir, con las mismas caminatas, como en el caso del error fuerte. Por lo tanto, se considera que esta manera de calcular el error débil, sobre los resultados del método FDTD, resulta adecuada y puede brindar información útil para hacer una comparación con el método de E-M.

4.7.3 Orden del Error de Convergencia

Para refinar la aproximación y disminuir el error en los métodos numéricos se deben hacer cambios a los parámetros como se discute a lo largo de la sección (4.6). Cuando se hacen simulaciones con distintos valores, con el fin de hacer evidente que hay mejoras en el error de aproximación, se puede observar dicho refinamiento en la solución y mejora en el error. Es usual utilizar parámetros en distintas escalas (10^1, 10^2, ..., 10^n), pues para estos valores el error mejora de manera muy clara. Para visualizar los datos de las gráficas con parámetros de este tipo se utilizan escalas logarítmicas en uno o ambos ejes, pues de esta manera los datos se pueden comparar de manera más eficiente.

Luego de ajustar los datos a una escala logarítmica, se puede puede aproximar una recta que los describa utilizando regresión lineal. La pendiente de dicha recta corresponde a la razón de convergencia del error que se desea aproximar, es decir, el orden γ con el cual converge un error es descrito por la pendiente de esta recta. Esto es porque al tomar un parámetro que mejora al modelo en un factor de k^γ se optó por reducir al parámetro k-veces, dado que los parámetros se refinan en una escala exponencial esto tiene sentido ya que los datos se ajustan a una escala logarítmica. Un ejemplo de esto es un error que converge con orden $\gamma = 1/2$, si se requiere reducir el error en un factor de 100 el paso temporal tendrá que reducirse en un factor de $100^2 = 10000$.

Para simplificar la notación se utiliza $\gamma(\eta)$ para denotar el orden de convergencia de η. Asimismo para los errores η_s y η_w también se utiliza esta notación.

4.8 Herramientas Relevantes para las Simulaciones

El lenguaje de programación que se utiliza es Julia 0.6.2. Julia. Este lenguaje es gratuito y compatible con los sistemas operativos Linux, Mac y Windows (además ofrece una plataforma en linea que no requiere de instalación). Se optó por este lenguaje por su buen desempeño y amplia gama de paquetes (basados en C y Fortran) compatibles con el computo científico. Además por ser similar a Python, Julia es versátil y fácil de mantener.

Se utiliza Git, que es una herramienta de control de versiones de software. El código implementado para esta tesis esta disponible en:

https://github.com/mundopacheco

CAPÍTULO 5

RESULTADOS

El estudio de las series de tiempo se puede beneficiar de visualizar de manera gráfica la evolución temporal de la PDF que las describe, por esta razón es de gran utilidad visualizar la ecuación de Fokker-Planck correspondiente. Además la visualización de dicha evolución temporal es una herramienta que permite entender la comparación de los resultados de los métodos numéricos de manera general. En este capítulo se presentan gráficas que permiten analizar el comportamiento de los distintos tipos de errores que se tienen en los métodos numéricos.

Otro tema que se aborda en este capítulo es cuanto tiempo pueden llegar a tardar los métodos numéricos en dimensión alta y como se comportan los distintos tipos de errores en tal dimensión. Aunque es en el capítulo (6) que se discuten las conclusiones a partir de las observaciones de este capítulo.

Para hacer la comparación de los métodos numéricos mediante el análisis de los errores, debe haber consistencia en los parámetros de las simulaciones, por esta razón a lo largo de este capítulo se presentan tablas que contienen los valores de dichos parámetros. Aunque hay parámetros de los métodos numéricos que cambian así como cambian los parámetros de las ecuaciones que se simulan, hay otros parámetros que permanecen iguales entre las simulaciones para distintos términos de arrastre y dimensión distinta. La tabla (5.1) describe los parámetros que pueden recibir los métodos numéricos, esta tabla aparece en las distintas secciones de la visualización de la ecuación, y varia según dimensión y versión del término de arrastre.

Nombre del parámetro	Valor
Delta de Dirac de la solución analítica	Coordenadas de la condición inicial Delta de Dirac que se da a la solución analítica, de la cual se obtienen las condiciones iniciales de los otros métodos.
Esperanza de la condición inicial	Esperanza de la condición inicial que se toma en caso de no contar con la solución analítica.
Varianza de la condición inicial	Varianza o matriz de covarianza de la condición inicial que se toma en caso de no contar con la solución analítica.
Término de arrastre	Regla de correspondencia del término de arrastre.
Término de difusión	Regla de correspondencia del término de difusión.
Dominio temporal	Dominio temporal para la simulación
Dominio espacial	Dominio espacial para la simulación
Cantidad de elementos en la malla espacial por dimensión para el método FDTD	Valor N con el cual se hacen discretos tanto al dominio espacial como al temporal.
Cantidad de caminatas aleatorias	Tamaño M de la muestra de caminatas aleatorias generados con el método de Euler-Maruyama, o bien la muestra aleatoria generada con la sabana del método FDTD.
Paso discreto espacial	Δx
Paso discreto temporal	Δt

Tabla 5.1: Descripción de los parámetros de las simulaciones.

Por otro lado la información que se obtiene con las simulaciones numéricas debe ser razonable y corresponder con lo que sugiere la teoría. Para ilustrar y entender la conducta teórica de la ecuación de Fokker-Planck se hace un análisis de la tendencia de los errores que se discuten en la sección (4.6), en este capítulo se presentan dichas gráficas. Hacer esto es de especial importancia pues con estas gráficas es posible calificar los resultados como buenas o malas aproximaciones.

Antes de pasar a la visualización de los métodos numéricos es importante mencionar que para simplificar la notación se denota por 1_D a la matriz cuadrada de $D \times D$ cuyas entradas son todas 1. Además, $\vec{1}_D$ denotará al vector de dimensión D cuyas entradas son 1.

5.1 Valoración Gráfica de los Métodos Numéricos

Con el fin de tener una comparación visual de las curvas que generan los métodos numéricos en esta sección se muestran las gráficas obtenidas en dimensión 1, 2 y 3 para las versiones de

la ecuación con arrastre constante y lineal. En los casos de coeficiente de arrastre constante se muestran las gráficas que se pueden generar con una solución analítica, mientras que para un coeficiente de arrastre lineal se muestran únicamente las gráficas de ambos métodos numéricos.

También cabe mencionar que para pasar de una versión numérica a otra se debe considerar que las funciones del término de arrastre no se describen de la misma manera numérica, pues aunque la regla de correspondencia de este término es la misma para ambas ecuaciones; en el caso de E-M las expresiones llevan como parámetro los valores del proceso estocástico que describen, mientras que las ecuaciones descritas por FDTD llevan como parámetro los posibles valores que pueden tomar dichos procesos estocásticos (el dominio espacial de la función). Esto se describe con más detalle en la sección (4.3.1).

Es importante mencionar que para la sección (5.1) no se consideran criterios que sean relevantes para los métodos numéricos en cuanto a los tiempos iniciales y de paro para las simulaciones. Sin embargo, estos valores son de especial importancia al hacer el análisis de los distintos tipos de errores que se consideran en los métodos numéricos. Por el contrario, para la cantidad de caminatas se considera siempre una cantidad $M > 10 \times N$ pues la visualización es muy pobre en otro caso. Sin embargo, dado que los errores de los métodos que se miden a partir de muestras se ven afectados por la cantidad de muestras, para otras secciones el valor de M es considerablemente mayor.

Las condiciones iniciales como se explica en la sección (4.5) pueden ser del tipo Delta de Dirac, este es el caso cuando se simula una ecuación con coeficiente de arrastre constante. Sin embargo la expresión del resto de las condiciones iniciales es la de una PDF normal multivariada:

$$f_{\boldsymbol{X}}(x_1, \cdots, x_n) = \frac{\exp\Big(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^T \Sigma^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})\Big)}{\sqrt{(2\pi)^n |\Sigma|}} \ ,$$

También dado que el método de Euler-Maruyama se utiliza para aproximar SDE's, es importante mencionar que se utilizan histogramas como se explica en la sección (2.2.2) considerando los criterios de la sección (4.4.3) para hacer las simulaciones de este capítulo (en los casos que se requieren histogramas).

5.1.1 Dimensión 1, Ecuación de Fokker-Planck con Término de Arrastre Constante

La figura (5.1.1.0.1) es una comparación de ambos métodos numéricos y la solución analítica en dimensión 1, esta es la comparación de las expresiones (3.17), (3.15) y (3.18). La tabla (5.2) contiene los parámetros con los cuales se hicieron las simulaciones de esta sección:

Nombre del parámetro	Valor
Delta de Dirac de la solución analítica	$x_0 = 0.9$
Término de arrastre	$\alpha(X_t) = \frac{1}{10}$
Término de difusión	$\beta(X_t) = \frac{1}{450}$
Dominio temporal	$[0.05, 8.05]$
Dominio espacial	$[0, 1]$
Paso discreto temporal	$\Delta t = \frac{1}{99}$
Paso discreto espacial	$\Delta x = \Delta t$
Cantidad de elementos en la malla espacial por dimensión para el método FDTD	$N = 100$
Cantidad de caminatas aleatorias	$M = 10^4$

Tabla 5.2: Parámetros de las simulaciones 1D, para la ecuación de Fokker-Planck con coeficiente de arrastre constante.

Es importante remarcar que para el caso de dimensión 1 no tiene sentido una matriz de correlaciones ya que se requieren por lo menos dos series de tiempo o procesos estocásticos para plantear la influencia que tiene uno sobre el otro. Además el valor de M no tiene ninguna consideración especial.

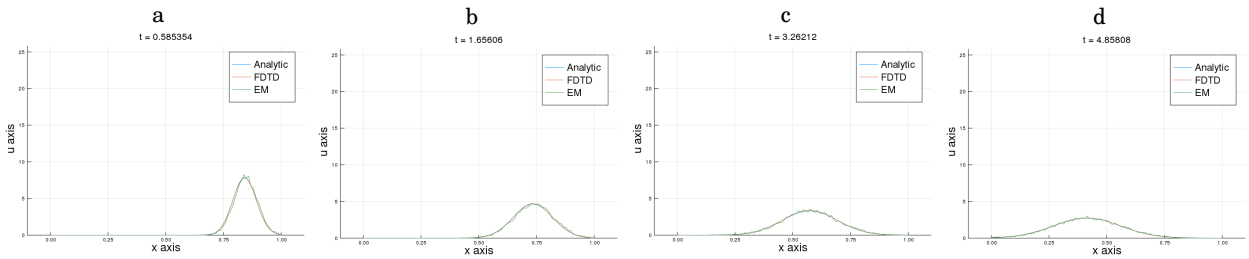

Figura 5.1.1.0.1: Comparación 1D, ecuación de Fokker-Planck con término de arrastre constante

Satisfactoriamente se observa que las curvas generadas con los métodos numéricos y la solución analítica caminan juntas en cada paso temporal como se esperaba.

5.1.2 Dimensión 1, Ecuación de Fokker-Planck con Término de Arrastre Lineal

La figura (5.1.2.0.1) es una comparación de ambos métodos numéricos en dimensión 1 con arrastre lineal. En la tabla (5.3) se exponen los parámetros con los cuales se hicieron las simulaciones de esta sección. El valor de M no tiene ninguna consideración especial. Con los parámetros de la tabla (5.3) las simulaciones que se obtienen son las siguientes:

Nombre del parámetro	Valor
Esperanza de la condición inicial	$\mu = 0.8$
Varianza de la condición inicial	$\sigma = 0.05$
Término de arrastre	$\alpha(X_t) = \frac{1}{10}X_t$
Término de difusión	$\beta(X_t) = \frac{1}{450}$
Dominio temporal	$[0.05, 8.05]$
Dominio espacial	$[0, 1]$
Paso discreto temporal	$\Delta t = \frac{1}{99}$
Paso discreto espacial	$\Delta x = \Delta t$
Cantidad de elementos en la malla espacial por dimensión para el método FDTD	$N = 100$
Cantidad de caminatas aleatorias	$M = 10^4$

Tabla 5.3: Parámetros de las simulaciones 1D, para la ecuación de Fokker-Planck con coeficiente de arrastre lineal.

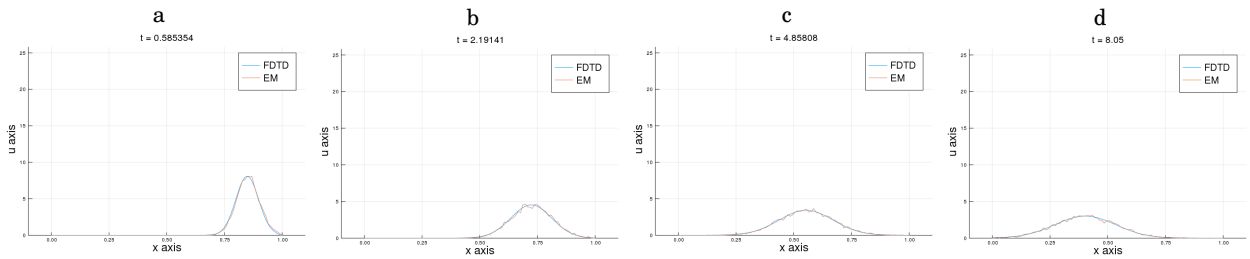

Figura 5.1.2.0.1: Comparación 1D, ecuación de Fokker-Planck con término de arrastre lineal

De manera análoga al caso de arrastre constante se observa que ambas curvas representan la misma solución a la ecuación de Fokker-Planck de dimensión 1.

5.1.3 Dimensión 2, Ecuación de Fokker-Planck con Término de Arrastre Constante

La figura (5.1.3.0.1) representa la evolución temporal de la ecuación de Fokker-Planck en dimensión 2 con un coeficiente del término de arrastre constante. Cada imagen de esta figura está compuesta por distintos elementos que son de izquierda a derecha: solución analítica, FDTD y Euler-Maruyama. En la tabla (5.4, se exponen los parámetros con los cuales se hicieron las simulaciones de esta sección correspondientes a la figura (5.1.3.0.1).

Para apreciar el desplazamiento y la difusión de la distribución descrita por la ecuación de Fokker-Planck se grafican dos proyecciones con cortes utilizando planos verticales al plano XY, de esta manera es posible apreciar las curvas normales proyectadas en los planos XZ y YZ. Alternativamente con el mismo fin se dan explícitamente la media y la varianza de las sabanas normales en el titulo de cada gráfica.

La posición los planos XY y YZ, cuya proyección es la gráfica inferior de cada imagen en la figura (5.1.3.0.1), se encuentran ambos en el valor ($x = y$) que aparece en el titulo de la imagen inferior junto con el valor del tiempo t de la solución. Estos cortes o proyecciones permiten hacer una comparación visual de los métodos numéricos con la solución analítica en dimensión 1.

Es posible apreciar en la figura (5.1.3.0.1) que ambos métodos numéricos tienen la misma media y una varianza muy parecida con un error pequeño en el método de FDTD.

Nombre del parámetro	Valor
Delta de Dirac de la solución analítica	$x_0 = (0.8)\vec{1}$
Término de arrastre	$\alpha(X_t^i) = 0.2$
Término de difusión	$\beta(X_t) = \frac{1}{1000}$
Dominio temporal	$[0.4, 1.5]$
Dominio espacial	$[0,1] \times [0,1]$
Paso discreto temporal	$\Delta t = \frac{1}{119}$
Paso discreto espacial	$\Delta x = \Delta y = \Delta t$
Cantidad de elementos en la malla espacial por dimensión para el método FDTD	$N = 120$
Cantidad de caminatas aleatorias	$M = 10^4$

Tabla 5.4: Parámetros de las simulaciones 2D, para la ecuación de Fokker-Planck con coeficiente de arrastre constante.

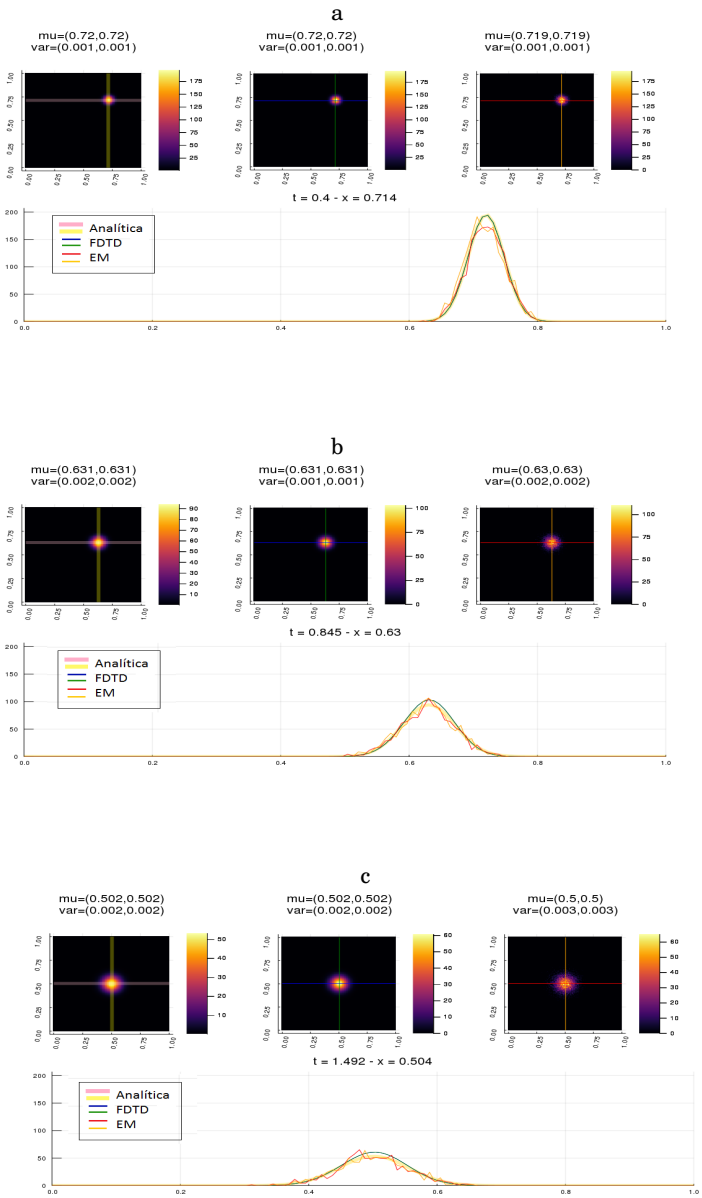

Figura 5.1.3.0.1: Visualización de la evolución temporal de la gráfica de Fokker-Planck 2D con coeficiente de arrastre constante. En cada figura se tiene un tiempo distinto de evolución al cual corresponden proyecciones en distintos planos: (a) $t = 0.4$ $x = y = 0.714$; (b) $t = 0.845$ $x = y = 0.63$; (c) $t = 1.492$ $x = y = 0.504$. Los parámetros de estas simulaciones son los de la tabla (5.4).

5.1.4 Dimensión 2, Ecuación de Fokker-Planck con Término de Arrastre Lineal

En la figura (5.1.4.0.1) se muestran las gráficas de la evolución temporal de ambos métodos numéricos de la ecuación de Fokker-Planck con arrastre lineal. Cada imagen de la figura (5.1.4.0.1) cuenta con los mismos elementos que la figura (5.1.3.0.1). Los parámetros de la simulación y de

la ecuación los siguientes:

Nombre del parámetro	Valor
Esperanza de la condición inicial	$\mu = (0.6)\vec{1}$
Varianza de la condición inicial	$\Sigma = (0.07)Id_2$
Término de arrastre	$\alpha(X_t^i) = 0.2X_t^j$
Término de difusión	$\beta(X_t) = \frac{1}{1000}$
Dominio temporal	$[0, 1.5]$
Dominio espacial	$[0, 1] \times [0, 1]$
Paso discreto temporal	$\Delta t = \frac{1}{119}$
Paso discreto espacial	$\Delta x = \Delta y = \Delta t$
Cantidad de elementos en la malla espacial por dimensión para el método FDTD	$N = 120$
Cantidad de caminatas aleatorias	$M = 10^4$

Tabla 5.5: Parámetros de las simulaciones 2D, para la ecuación de Fokker-Planck con coeficiente de arrastre lineal.

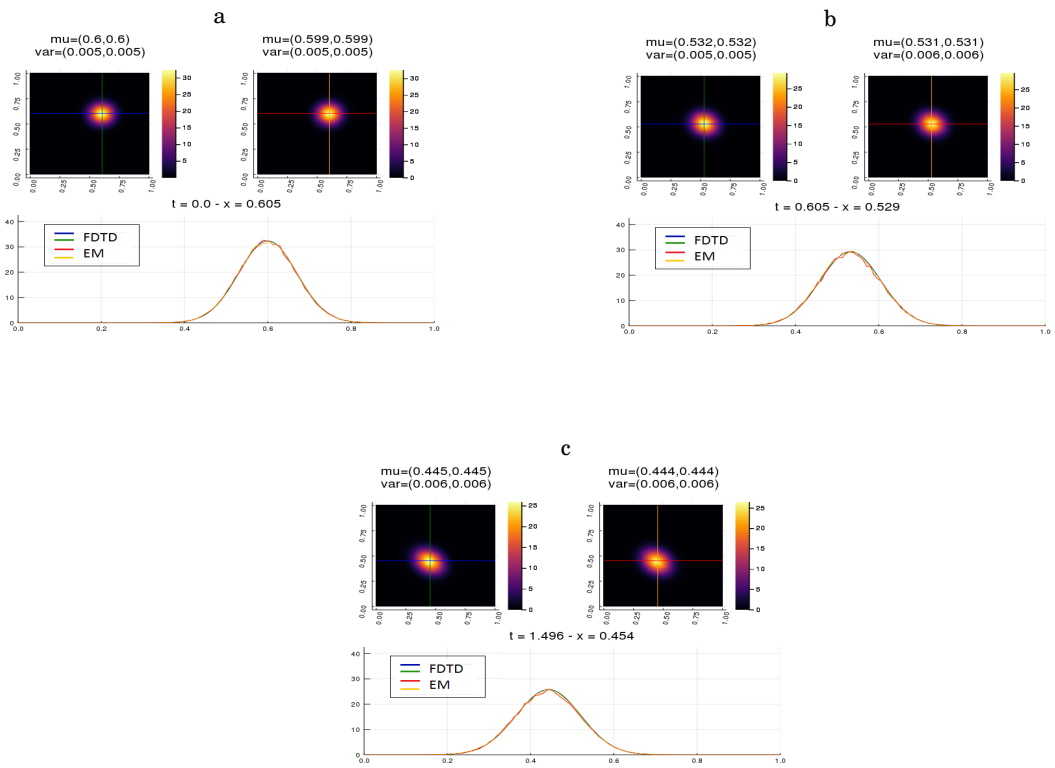

Figura 5.1.4.0.1: Visualización de la evolución temporal de la gráfica de Fokker-Planck 2D con coeficiente de arrastre lineal. En cada figura se tiene un tiempo distinto de evolución al cual corresponden proyecciones en distintos planos: (a) $t = 0.0$ $x = y = 0.605$; (b) $t = 0.121$ $x = y = 0.529$; (c) $t = 0.299$ $x = y = 0.454$. Los parámetros de estas simulaciones son los de la tabla (5.4).

En las proyecciones se puede apreciar el parecido que tienen estas simulaciones, pues el parecido que tienen estas gráficas es evidente en dichas proyecciones.

5.1.5 Dimensión 3, Ecuación de Fokker-Planck con Término de Arrastre Constante

En dimensión 3 no es posible visualizar las gráficas que se obtienen en las simulaciones de manera directa, pues la representación gráfica de la solución u, corresponde a tres dimensiones espaciales, no se puede hacer mediante una superficie, porque sería requerida una cuarta dimensión en la figura. En consecuencia para hacer esta representación se escogió hacer cortes, fijando una de las dimensiones espaciales y representar a u con una escala de color.

En estas simulaciones se requiere de una cantidad mayor de caminatas aleatorias, para obtener con los cortes una visualización buena debe hacer una muestra útil en cada corte, para ello se puede utilizar una M mayor. Los parámetros que reciben los métodos numéricos de la figura (5.1.5.0.4) son:

Nombre del parámetro	Valor
Delta de Dirac de la solución analítica	$x_0 = (0.85)\vec{1}$
Término de arrastre	$\alpha(X_t^i) = 0.2$
Término de difusión	$\beta(X_t) = \frac{1}{1000}$
Dominio temporal	$[0.4, 1.5]$
Dominio espacial	$[0,1] \times [0,1] \times [0,1]$
Paso discreto temporal	$\Delta t = \frac{1}{119}$
Paso discreto espacial	$\Delta x = \Delta y = \Delta z = \Delta t$
Cantidad de elementos en la malla espacial por dimensión para el método FDTD	$N = 120$
Cantidad de caminatas aleatorias	$M = N^D$

Tabla 5.6: Parámetros de las simulaciones 3D, para la ecuación de Fokker-Planck con coeficiente de arrastre constante.

Las gráficas son por renglones: solución analítica, FDTD y Euler-Maruyama. Las condiciones iniciales en este caso están dadas por la solución analítica según la Delta de Dirac de la tabla (5.6).

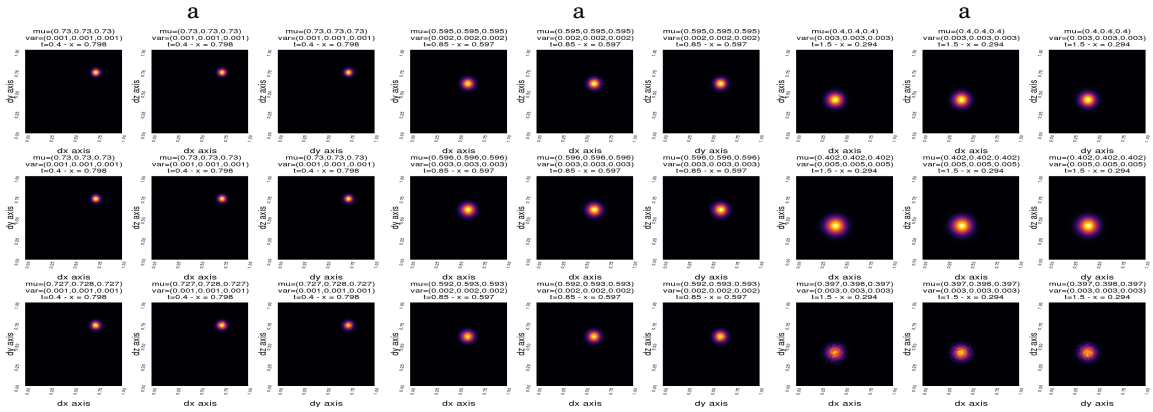

Figura 5.1.5.0.1: *t = 0.4* **Figura 5.1.5.0.2:** *t = 0.85* **Figura 5.1.5.0.3:** *t = 1.5*

Figura 5.1.5.0.4: Visualización de la evolución temporal de la gráfica de Fokker-Planck 3D con coeficiente de arrastre constante. En cada figura se tiene un tiempo distinto de evolución al cual corresponden proyecciones en distintos planos: (a) $t = 0.4$ $x = y = z = 0.798$; (b) $t = 0.85$ $x = y = z = 0.597$; (c) $t = 1.5$ $x = y = z = 0.294$. Los parámetros de estas simulaciones son los de la tabla (5.6).

5.1.6 Dimensión 3, Ecuación de Fokker-Planck con Término de Arrastre Lineal

En la figura (5.1.6.0.1) se muestran las gráficas de los métodos numéricos sin la solución analítica como en la gráfica anterior, ya en el caso del coeficiente de arrastre lineal no se cuenta con una solución analítica. Los parámetros que reciben los métodos numéricos de la figura en esta sección son:

Nombre del parámetro	Valor
Esperanza de la condición inicial	$\mu = (0.85)\vec{1}$
Varianza de la condición inicial	$\Sigma = \frac{1}{20} * Id_3$
Término de arrastre	$\alpha(X_t^i) = (0.2)X_t^j$
Término de difusión	$\beta(X_t) = \frac{1}{1000}$
Dominio temporal	$[0.4, 1.5]$
Dominio espacial	$[0,1] \times [0,1] \times [0,1]$
Paso discreto temporal	$\Delta t = \frac{1}{119}$
Paso discreto espacial	$\Delta x = \Delta y = \Delta z = \Delta t$
Cantidad de elementos en la malla espacial por dimensión para el método FDTD	$N = 120$
Cantidad de caminatas aleatorias	$M = N^D$

Tabla 5.7: Parámetros de las simulaciones 3D, para la ecuación de Fokker-Planck con coeficiente de arrastre lineal.

De manera análoga al caso 3D con para coeficiente constante, se utiliza una cantidad mayor

para esta visualización de las simulaciones.

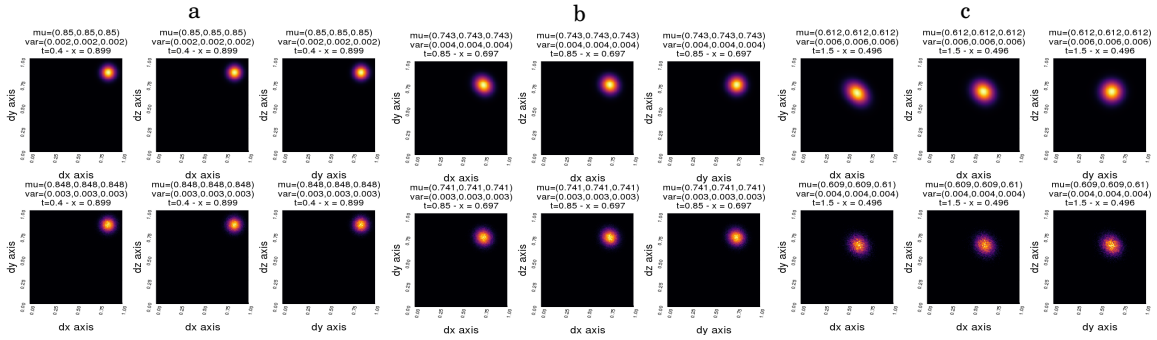

Figura 5.1.6.0.1: Visualización de la evolución temporal de la gráfica de Fokker-Planck 3D con coeficiente de arrastre lineal. En cada figura se tiene un tiempo distinto de evolución al cual corresponden proyecciones en distintos planos: (a) $t = 0.4$ $x = y = z = 0.899$; (b) $t = 0.85$ $x = y = z = 0.697$; (c) $t = 1.5$ $x = y = z = 0.496$. Los parámetros de estas simulaciones son los de la tabla (5.7).

La visualización es consistente con la teoría que se tiene para la solución según las condiciones iniciales y campos vectoriales que se dan a la ecuación como parámetros. Sin embargo, un parecido visual no basta para concluir que ambas métodos aproximan a la ecuación de Fokker-Planck. Para ello se hace un análisis del error en la siguiente sección (5.2).

5.2 Errores por Convergencia Débil y Fuerte

En esta sección se presentan las gráficas de los errores de aproximación por convergencia débil y fuerte para Euler-Maruyama, y para FDTD las gráficas del error por convergencia débil. En ambos errores se considera una SDE con coeficiente de arrastre constante, ABM (3.18), cuya ecuación de Fokker-Planck correspondiente es (3.15) con la cual se generan muestras aleatorias como se discute en la sección (4.7.2) para medir el error por convergencia débil de este método.

Para que el orden del error tenga una pendiente clara, se dan parámetros óptimos que les permita a los métodos numéricos generar aproximaciones que claramente mejoren al refinar los parámetros que la teoría sugiere que se deben mejorar.

Hay algunos criterios que se deben considerar para observar la razón de convergencia, en este tipo de errores es de especial importancia el tamaño del paso temporal aún si el espacial no es de tanto interés. Esto se debe a que el método de Euler-Maruyama se utiliza para aproximar SDE's, el refinamiento del dominio temporal disminuye la esperanza de que un proceso se aleje del otro y disminuye la distancia entre las esperanzas.

Nombre del parámetro	Valor
Delta de Dirac	$x_0 = 0.5$
Término de arrastre	$\alpha(X_t) = \frac{1}{10}$
Término de difusión	$\beta(X_t) = \frac{1}{100}$
Dominio temporal	$[0,1]$
Dominio espacial	$[0,1]$
Tamaño de la muestra aleatoria	$M = 10^4$
Pasos discretos temporales	$\Delta t \in \{2^{-10}, 2^{-7}, 2^{-5}\}$
Pasos discretos espaciales	$\Delta x = \Delta t$

Tabla 5.8: Valores de los parámetros de las simulaciones que reflejan una mejora en el método E-M, al mejorar la discretización espacial.

Se puede apreciar que al tomar una discretización mayor para el intervalo de tiempo en el cual se aproxima con el método de E-M, para procesos de dimensión 1, las caminatas aleatorias se parecen más entre sí en la figura (5.2.0.0.1) que corresponden a los parámetros de la tabla (5.8).

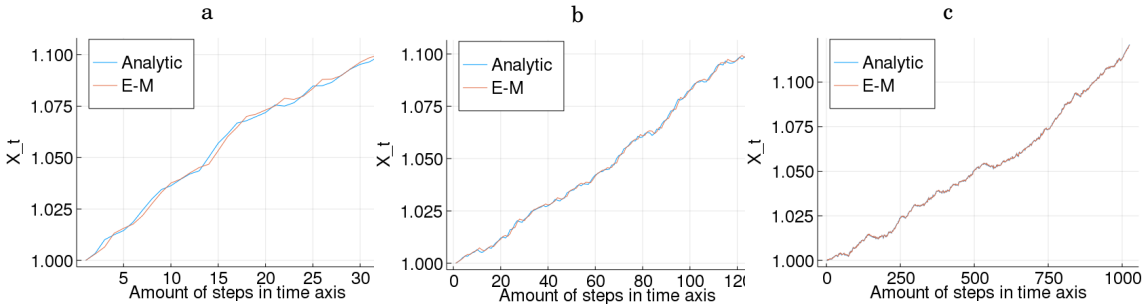

Figura 5.2.0.0.1: Visualización de la aproximación con E-M utilizando un dominio temporal con mayor cantidad de pasos.. La curva azul corresponde a la expresión analítica de un ABM, mientras que la roja corresponde a la aproximación por E-M. Ambas se generan con el mismo ruido blanco. Es claro que la aproximación mejora con una mejor discretización del dominio temporal.

Otro criterio importante es la cantidad de caminatas aleatorias, pues como se discute en la sección (4.6.2) la razón o el orden de la convergencia de estos se ven afectados por este valor M. Sin embargo, esta discusión se hace en la sección (5.2.2).

5.2.1 Convergencia Débil

Los parámetros óptimos con lo cuales se generaron las gráficas de la figura (5.2.1.0.1) en la cual se puede visualizar la razón de convergencia del error por convergencia débil, son los de la siguiente tabla (5.9).

Nombre del parámetro	Valor
Delta de Dirac	$x_0 = (0.5)\vec{1}$
Término de arrastre	$\alpha(X_t) = \frac{1}{10}$
Término de difusión	$\beta(X_t) = \frac{1}{100}$
Dominio temporal	$[0,1]$
Dominio espacial	$\prod_{i=1}^{D}[0,1]$
Tamaño de la muestra aleatoria	$M = 10^4$
Pasos discretos temporales	$\Delta t \in \{2^{-9}, 2^{-8}, 2^{-7}, 2^{-6}\}$
Pasos discretos espaciales	$\Delta x = \Delta t$

Tabla 5.9: Valores de los parámetros de las simulaciones correspondientes a $\gamma(\eta_w)$.

Dado que el orden de convergencia depende del valor Δt que hace discreto al dominio tiempo, el eje de las abscisas corresponde a tales valores, mientras que el eje de las ordenadas corresponde al error que se obtiene para dicha Δt. Para estas gráficas se utilizan ejes logarítmicos con el fin de visualizar de manera clara el orden de convergencia de estos errores. También se utiliza como referencia visual una recta punteada con la pendiente adecuada al orden con la que debe converger E-M, este formato se toma para las gráficas de η_w y η_s, para el caso de η se omite la recta punteada de referencia.

La figura (5.2.1.0.1) muestra el comportamiento de la convergencia débil de ambos métodos, se puede apreciar en particular que la razón de convergencia del método E-M es aproximadamente 1 para las tres dimensiones, lo cual es consistente con lo que se discute en la sección (4.6.2).

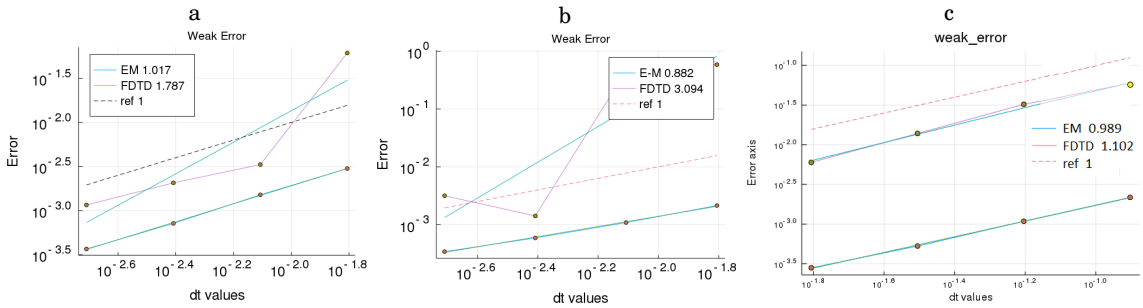

Figura 5.2.1.0.1: Gráficas de η_w para las primeras dimensiones: (a) dimensión 1, (b) dimensión 2 y (c) dimensión 3.

Las razones de convergencia de la figura anterior se presentan en la tabla (5.10):

Dimensión	FDTD	E-M
1	1.787	1.017
2	3.094	0.882
3	1.102	0.989

Tabla 5.10: Tabla de $\gamma(\eta_w)$ para las primeras dimensiones de ambos métodos.

Se observa que el error débil efectivamente se puede medir sobre resultados del método FDTD, y se compara de manera semejante a lo esperado: disminuyendo como una ley de potencia cuando se refina la simulación, y especialmente en el caso de tres dimensiones espaciales con un orden de convergencia consistente a lo que se observa en el método E-M.

El orden de convergencia para FDTD en los casos de una y dos dimensiones espaciales, posiblemente se apeguen mejor al correspondiente al método de E-M, si se calculan usando un tamaño de muestreo M más grande.

Adicionalmente, se observa que el error débil correspondiente FDTD es, en casi todos los casos, aproximadamente un orden de magnitud mayor al método de E-M.

También es posible observar en la figura(5.2.2.0.2) que la convergencia de η_w mejora para el método FDTD, en dimensión 1, al tomar muestras aleatorias mayores:

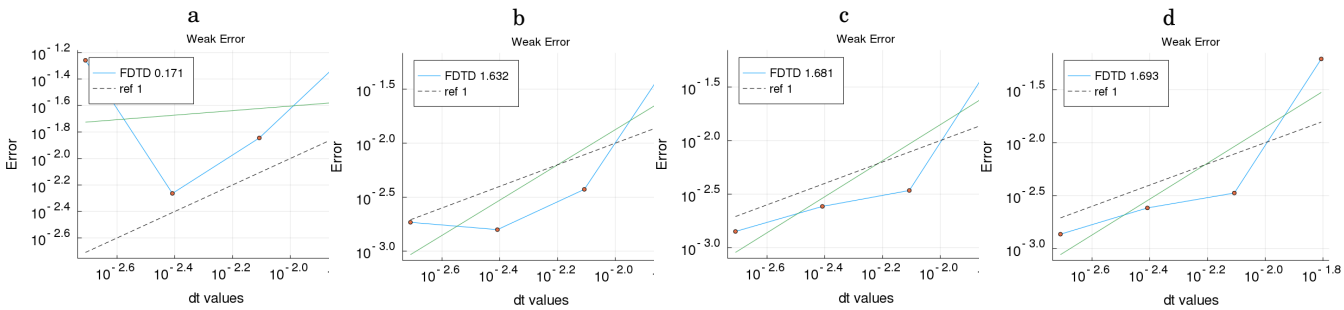

Figura 5.2.1.0.2: Visualización de la convergencia de FDTD 1D con mayor cantidad de muestras aleatorias para η_w. (a) $M = 10$, (b) $M = 10^2$, (c) $M = 10^5$, (d) $M = 10^6$.

Efectivamente la pendiente de convergencia de η_w mejora cuando el método de FDTD utiliza una muestra mayor. Las pendientes son las siguientes:

M	FDTD $\gamma(\eta_w)$
10	0.171
10^2	1.632
10^5	1.681
10^6	1.693

Tabla 5.11: Tabla de $\gamma(\eta_w)$ para FDTD con mayor M.

5.2.2 Convergencia Fuerte

Los parámetros óptimos con lo cuales se generaron las gráficas de la figura (5.2.2.0.1) en la cual se puede visualizar la razón de convergencia del error por convergencia fuerte, η_s, son los de la siguiente tabla (5.12).

Nombre del parámetro	Valor
Delta de Dirac	$x_0 = (0.8)\vec{1}$
Término de arrastre	$\alpha(X_t) = \frac{3}{20}$
Término de difusión	$\beta(X_t) = \frac{1}{1000}$
Dominio temporal	$[0,1]$
Dominio espacial	$\prod_{i=1}^{D}[0,1]$
Tamaño de la muestra aleatoria	$M = 10^4$
Pasos discretos temporales	$\Delta t \in \{2^{-8}, 2^{-7}, 2^{-6}, 2^{-5}\}$
Pasos discretos espaciales	$\Delta x = \Delta t$

Tabla 5.12: Valores de los parámetros de las simulaciones correspondientes a $\gamma(\eta_s)$.

La figura (5.2.2.0.1) muestra la convergencia fuerte para el método de Euler-Maruyama, donde se puede apreciar que la pendiente del método E-M es 1/2 de manera consistente.

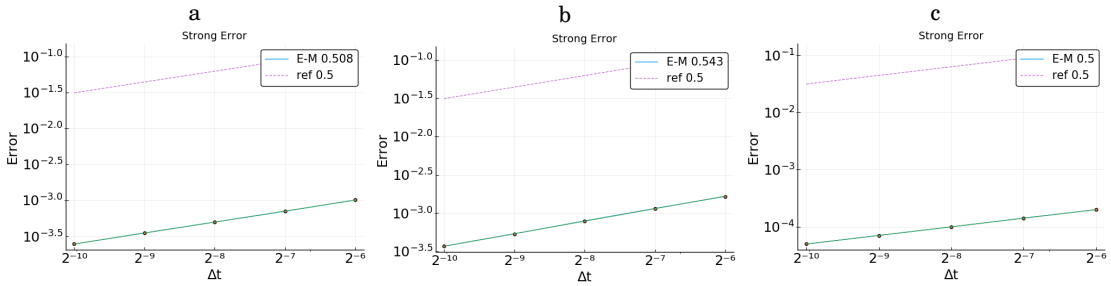

Figura 5.2.2.0.1: Gráficas de η_s para las primeras dimensiones: (a) dimensión 1, (b) dimensión 2 y (c) dimensión 3.

Las razones de convergencia de la figura anterior se presentan en la tabla (5.10):

Dimensión	E-M
1	0.506
2	0.495
3	0.506

Tabla 5.13: Tabla de $\gamma(\eta_s)$ para las primeras dimensiones de E-M.

Es posible inferir que el método de Euler-Maruyama se comporta según lo que indica la teoría, ya que para una cantidad razonable de caminatas aleatorias se tiene una buena aproximación de la media del proceso que se aproxima.

Se considera que la convergencia de los errores de los métodos que utilizan muestras aleatorias mejora al tomar una cantidad mayor de las muestras. En la figura (5.2.2.0.2) se puede ver que η_s converge con el método de E-M, con una pendiente más parecida a lo que sugiere la teoría al incrementar el tamaño de la muestra:

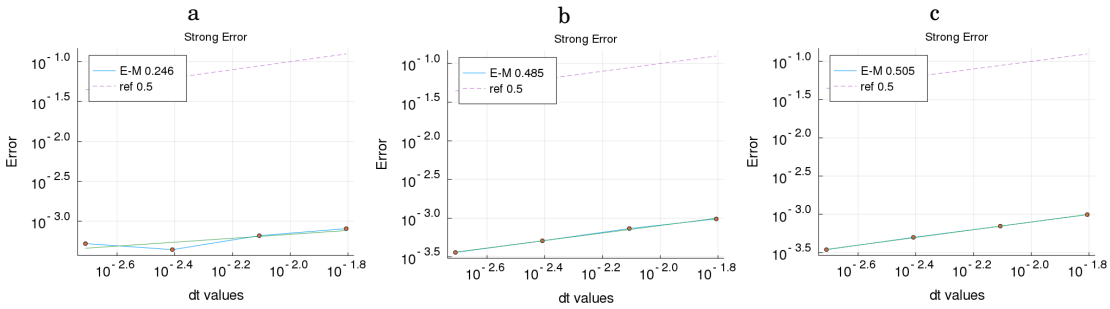

Figura 5.2.2.0.2: Visualización de la convergencia de E-M con mayor cantidad de muestras aleatorias para η_s. (a) $M = 10$, (b) $M = 10^3$, (c) $M = 10^4$.

La pendiente de convergencia de η_s mejora cuando el método de Euler-Maruyama utiliza una muestra mayor. Las pendientes son las siguientes:

M	E-M $\gamma(\eta_s)$
10	0.246
10^2	0.485
10^4	0.505

Tabla 5.14: Tabla de $\gamma(\eta_s)$ para E-M con mayor M.

5.3 Convergencia de η

Utilizando distintos valores de Δt para hacer discretos al dominio temporal y espacial como se discute en la sección (4.6) es posible observar el orden de convergencia del error η para ambos métodos numéricos. Sin embargo, únicamente se contó con la solución analítica para la ecuación de Fokker-Planck con coeficiente de arrastre constante, por lo cual la comparación del método FDTD se hace únicamente para el caso del arrastre constante, y utilizando la aproximación de FDTD como referencia para analizar al error η para E-M, como se discute en (4.7).

Es importante resaltar que en el caso de la simulación de E-M tanto para la ecuación con término de arrastre lineal como para el de término de arrastre constante, en este trabajo se utilizan de manera arbitraria al menos $M = N^D$ caminatas aleatorias para observar la convergencia de η. Esto se discute con mayor detalle en la sección (5.3.1) aunque sólo se hace evidente para el caso de la ecuación constante.

5.3.1 Ecuación con Término de Arrastre Constante

Para garantizar la convergencia de este error para el método de E-M, se requieren suficientes caminatas aleatorias, una forma de comprobar esto es utilizando distintos parámetros para

hacer las simulaciones. La figura (5.3.1.0.1) muestra la convergencia de η para ambos métodos, considerando una ecuación de Fokker-Planck con coeficiente constante.

Nombre del parámetro	Valor
Delta de Dirac de la solución analítica	$\boldsymbol{x}_0 = .8(\vec{1}_D)$
Término de arrastre	$\alpha(X_t^i) = 0.2$
Término de difusión	$\beta(X_t) = \frac{1}{1000}$
Dominio temporal	$[0.4, 1.5]$
Dominio espacial	$\prod_{i=1}^{D}[0,1]$
Pasos discretos temporales	$\Delta t \in \{2^{-8}, 2^{-7}, 2^{-6}, 2^{-5}\}$
Cantidad de elementos en la malla espacial por dimensión para el método FDTD, con p según Δt	$N = 2^{p \times D}$
Cantidad de caminatas aleatorias	$M = N^D$
Pasos discreto espaciales	$\Delta z = \Delta y = \Delta x = \frac{1}{\Delta t^{1/D}}$

Tabla 5.15: Parámetros de las simulaciones utilizadas para medir $\gamma(\eta)$ con la ecuación con término de arrastre constate.

De la tabla (5.15) se obtienen las gráficas para las primeras tres dimensiones de la convergencia de η, con una buena convergencia del método de E-M:

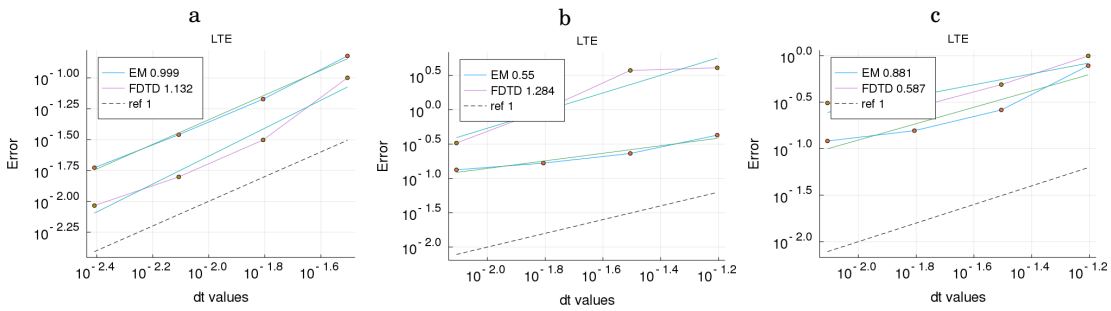

Figura 5.3.1.0.1: Gráfica de η para la ecuación con arrastre constante de ambos métodos, de las primeras tres dimensiones: (a) dimensión 1, (b) dimensión 2 y (c) dimensión 3.

En la figura (5.3.1.0.1) se observa el orden de convergencia de η al aumentar la cantidad de pasos en la discretización (espacial y temporal) del método por FDTD. En la siguiente tabla se presentan las pendientes con las que converge este error para esta versión de la ecuación en estas 3 dimensiones:

Dimensión	FDTD	E-M
1	1.132	0.999
2	1.284	0.55
3	0.587	0.881

Tabla 5.16: Tabla de $\gamma(\eta)$ para las primeras dimensiones correspondiente a la ecuación de Fokker-Planck con coeficiente de arrastre constate.

Sin embargo el error η no muestra una convergencia para el método de E-M al considerar una cantidad insuficiente de caminatas aleatorias, en dimensión 1 para la ecuación con término de arrastre constante se puede observar al tomar distintos valores de M:

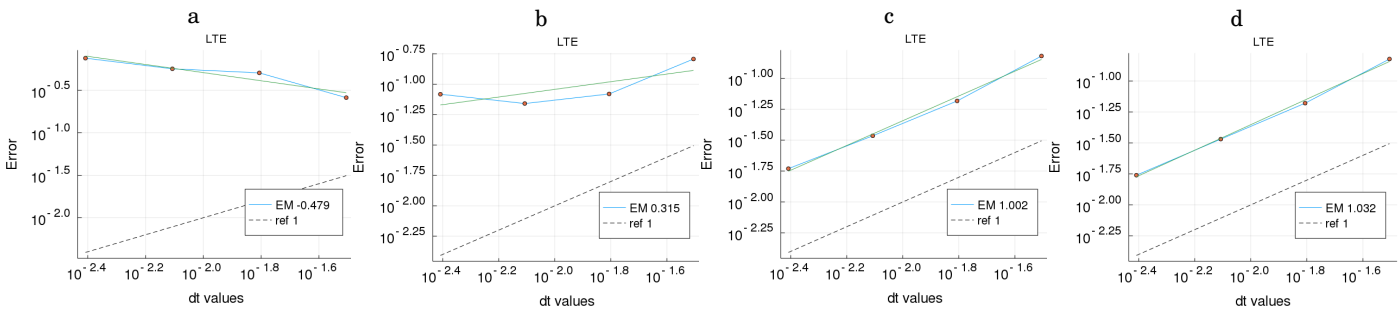

Figura 5.3.1.0.2: Gráfica de η para el método de E-M con la ecuación de término de arrastre constante utilizando distintas cantidades de caminatas aleatorias: (a) $M = 10^2$, (b) $M = 10^4$, (c) $M = 10^6$ y (d) $M = 10^7$.

En la figura (5.3.1.0.2) se observa una pendiente que empeora al subir de dimensión. Esto es porque los histogramas con los que se desea aproximar la ecuación de Fokker-Planck son pobres en el sentido de que no hay suficientes muestras que cuantificar. En la siguiente tabla se presentan las pendientes correspondientes a la figura anterior:

M	Pendiente
10^2	-0.479
10^4	0.315
10^6	1.002
10^7	1.0032

Tabla 5.17: Tabla de $\gamma(\eta)$ del método EM con distintos valores de M. (a) $M = 10^2$, (b) $M = 10^4$, (c) $M = 10^6$, (d) $M = 10^7$.

La convergencia de η se puede medir para el método de Euler-Maruyama cuando se toman suficientes caminatas aleatorias, en tal caso el error η converge como una ley de potencia al hacer refinaciones sobre las mallas espacial y temporal del dominio de la ecuación.

Se puede observar que el error en Euler-Maruyama es mayor aún en el caso en el cual este converge, y más aún el orden de convergencia del método FDTD es mejor para el error η.

5.3.2 Ecuación con Término de Arrastre Lineal

En la figura (5.3.2.0.1) se observan las pendientes con las que convergen los métodos al aproximar una solución con arrastre lineal. En este caso no se implementó la solución analítica, y se compara el método de Euler-Maruyama con el de FDTD. Para estas simulaciones se consideran los parámetros de la tabla (5.18)

Nombre del parámetro	Valor
Esperanza de la condición inicial	$\mu = 0.85(\vec{1}_D)$
Varianza de la condición inicial	$\Sigma = \frac{1}{20} * Id_3$
Término de arrastre	$\alpha(X_t^i) = (0.2)X_t^j$
Término de difusión	$\beta(X_t) = \frac{1}{1000}$
Dominio temporal	$[0.4, 1.5]$
Dominio espacial	$\prod_{i=1}^{D}[0,1]$
Pasos discretos temporales	$\Delta t \in \{2^{-8}, 2^{-7}, 2^{-6}, 2^{-5}\}$
Cantidad de elementos en la malla espacial por dimensión para el método FDTD, con p según Δt	$N = 2^{p \times D}$
Cantidad de caminatas aleatorias	$M = N^D$
Pasos discreto espaciales	$\Delta z = \Delta y = \Delta x = \frac{1}{\Delta t^{1/D}}$

Tabla 5.18: Parámetros de las simulaciones utilizadas para medir $\gamma(\eta)$ con la ecuación con término de arrastre constate.

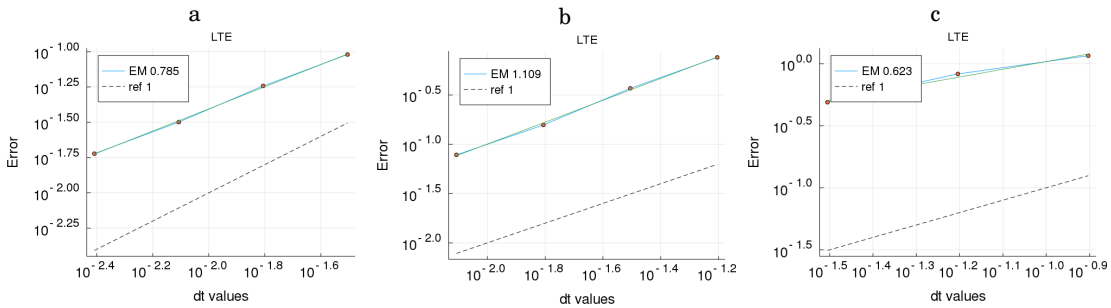

Figura 5.3.2.0.1: Convergencia de η en el método de Euler-Maruyama para la ecuación de Fokker-Planck con arrastre lineal, de las primeras tres dimensiones: (a) dimensión 1, (b) dimensión 2 y (c) dimensión 3.

Es importante observar que la convergencia en dimensión 3 se observa mejor para valores $\Delta t \in \{2^{-5}, 2^{-4}, 2^{-3}\}$, pues los errores para valores Δt ya no disminuyen de manera clara.

Dado que Euler-Maruyama funciona para ecuaciones estocásticas el valor que se obtenga para η, se ve afectado por la cantidad de caminatas aleatorias que se utilizan. En la tabla (5.19) se encuentran las pendientes de la figura anterior.

Dimensión	Pendiente
1	0.785
2	1.109
3	0.623

Tabla 5.19: Razones de convergencia del error η para el método de Euler-Maruyama con la ecuación de Fokker-Planck con arrastre lineal.

Es importante hacer notar que el error η se puede medir aún en caso de no contar con una solución analítica.

Por otra parte los valores de la tabla (5.19) son muy parecidos a los que se esperan para el método FDTD, lo cual es un buen resultado sin embargo se sebe discutir el tiempo de ejecución para ambos métodos considerando los resultados obtenidos en las secciones (5.3) y (5.2).

5.4 Error y Tiempo de Ejecución

Un resultado importante que se puede observar de los resultados de las secciones (5.3) y (5.2) es que los errores η_w, η_s y η disminuyen como una ley de potencia al refinar las simulaciones correspondientes. Esto hace evidente que ambos métodos numéricos, muy distintos entre sí, están describiendo lo mismo, lo cual soporta cuantitativamente la validez de los resultados en ambos casos.

Una mejor aproximación de la solución de la ecuación de Fokker-Planck requiere de un mayor tiempo de ejecución, esto sucede en ambos métodos ya que para obtener un menor error se requiere de una mejor discretización del dominio de la ecuación. Asimismo sabemos que aumenta el tiempo de ejecución al subir de dimensión en la ecuación de Fokker-Planck que se desea aproximar, por lo cual vale la pena predecir como se espera que se comporten los distintos tipos de errores en relación a la dimensión y al tiempo.

5.4.1 Razones de Convergencia

Aunque hacer predicciones con pocos datos puede ser impreciso, hay tendencias que son claras y estas son de especial interés para esta tesis ya que el tiempo de ejecución y el error que se puede esperar no se deben ignorar al trabajar con una ecuación de dimensión alta.

Con los valores de las tabla (5.10) se puede hacer una predicción de la pendiente con la que convergen los errores por convergencias débil y fuerte de ambos métodos numéricos. En el caso

de FDTD para dimensión 50 se espera que la pendiente del error débil sea 0.659 mientras que la pendiente del error en Euler-Maruyama se mantiene como .828 cercano a 1.

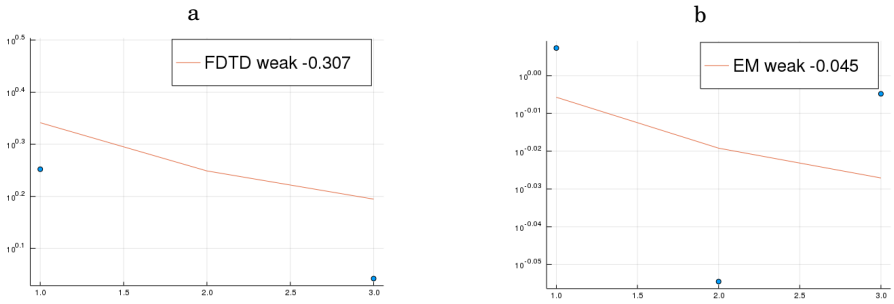

Figura 5.4.1.0.1: Ajuste con regresión lineal para la predicción de η_w de ambos métodos: (a) FDTD y (b) E-M.

Para los datos de la tabla (5.14) se puede observar haciendo un ajuste lineal que el error en Euler-Maruyama se mantiene en 0.4966 cercano a 0.5 que es el valor que se espera.

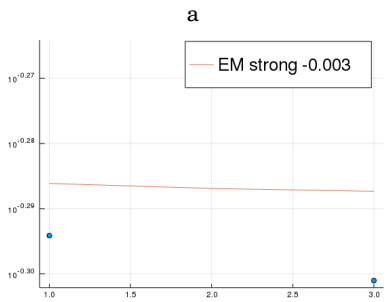

Figura 5.4.1.0.2: Ajuste con regresión lineal para la predicción de η_s de EM.

Por el otro lado, se tienen los datos de las tablas del error η, los valores registrados en la tabla (5.16) son la pendiente con la que converge el error por dimensión. Con una regresión podemos predecir la pendiente en mayor dimensión, la pendiente de convergencia del error η en dimensión 50 sería 0.411, lo cual indica que el error aumentaría para mayor dimensión, sin embargo el error sigue convergiendo para mayor dimensión.

Ambos métodos numéricos sirven para aproximar la solución a la ecuación como se puede apreciar con la convergencia en las gráficas de las secciones (5.3) y (5.2). Por esta razón es que la aplicación que se tiene en mente determina cual de los dos métodos es más adecuado, para determinar esto es importante el hecho de que se pretende aproximar la ecuación en dimensión alta. Para concluir cual de esto métodos numéricos es más adecuado para aproximar la ecuación de Fokker-Planck es razonable discutir el tiempo de ejecución en ambos métodos.

5.4.2 Tiempos de Ejecución

Ambos métodos numéricos pueden llegar a requerir de muchos recursos computacionales, por un lado FDTD con DS en dimensión D con N pasos en cada dimensión espacial el número de operaciones es $D!(N^{D-1})$. Por el otro lado, para mejorar la precisión en Euler-Maruyama se deben tomar suficientes caminatas aleatorias por cada uno de los N pasos espaciales de cada dimensión, lo cual puede ser tan costoso como FDTD.

Una manera inmediata de comparar ambos métodos es considerando cuanto tardan en correr, en la tabla (5.20) se muestra el tiempo (en segundos) que tardan en correr los métodos numéricos en una ejecución con parámetros $N = 300$ y $M = 10^4$:

Dimensión	E-M	FDTD
1	16.003	0.2422
2	28.98	1.26
3	45.56	41,218.13
50	624.70	6.04×10^{11}

Tabla 5.20: Tiempo de ejecución de los métodos numéricos para $N = 300$ y $M = 10^4$.

En la tabla (5.20) se puede ver que el tiempo de ejecución del método de Euler-Maruyama es moderado, por el otro lado para estos parámetros el método de FDTD tarda 41,218 segundos en completar la simulación en dimensión 3. Sin embargo para una ejecución con $N = 200$ y $M = N^D$ se tiene:

Dimensión	E-M	FDTD
1	0.3807	0.2206
2	296.38	0.5913
3	150,367.9	2,159
50	9.25×10^{18}	6.04×10^{11}

Tabla 5.21: Tiempo de ejecución de los métodos numéricos para $N = 200$ y $M = N^D$.

Esto es relevante pues para los valores de la tabla (5.20) el método de Euler-Maruyama tiene convergencia débil y fuerte, sin embargo con estos parámetros para este método no hay convergencia del error η. En la figura (5.4.2.0.1) se muestra la gráfica correspondiente a la figura (5.20):

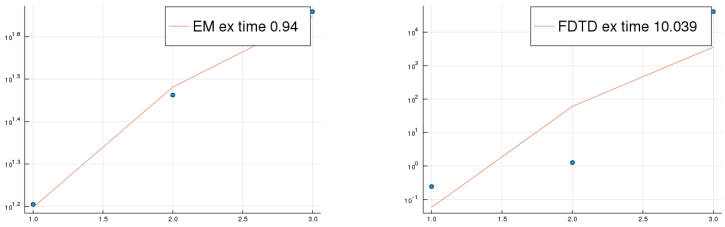

Figura 5.4.2.0.1: Gráficas del ajuste lineal de la tabla (5.20).

Por el otro lado con los parámetros con los que se genera la tabla (5.21) se tienen todos los tipos de convergencia del método de Euler-Maruyama. En la figura (5.4.2.0.2) se muestra la gráfica correspondiente a la figura (5.21):

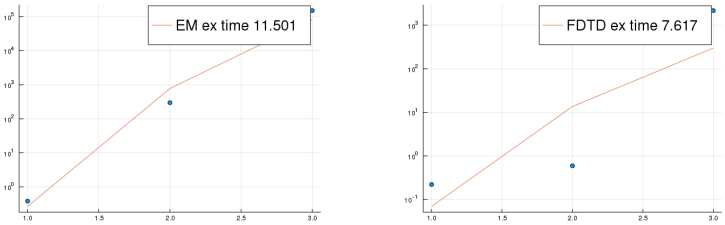

Figura 5.4.2.0.2: Gráficas del ajuste lineal de la tabla (5.21).

No es razonable utilizar un método de Monte Carlo con una cantidad tan elevada de muestras aleatorias pues la eficiencia es nula en este caso. Sin embargo se busca aproximar la ecuación de Fokker-Planck y es entonces que se debe sacrificar la convergencia del error por la eficiencia en el tiempo de ejecución.

CAPÍTULO 6

CONCLUSIONES

La aplicación que motivo este trabajo es el análisis de series de tiempo rsfMRI. Dicha aplicación ha guiado los parámetros y requerimientos de las aproximaciones numéricas. Estos parámetros y requerimientos son la razón por la cual se puede concluir con algunas reticencias que el método de Euler-Maruyama es el indicado para aproximar la ecuación de Fokker-Planck.

6.1 Valoración de los Resultados

Hay consideraciones generales que se hacen al utilizar los métodos numéricos, por ejemplo: el método FDTD aproxima de manera directa una ecuación de Fokker-Planck mientras que Euler-Maruyama lo hace con un método de Monte Carlo. Estas consideraciones son importantes pues dan pauta a los aspectos que se deben considerar al elegir un método para aproximar la ecuación. Algunas consideraciones generales que ayudan a entender cómo se comportan los métodos numéricos y qué cualidades son importantes en esta valoración son las siguientes:

E-M	FDTD	
Sí	No	Compatibilidad con condiciones iniciales de Delta de Dirac
Sí	Sí	Capacidad de implementar coeficientes de arrastre no lineales.
Sí	Sí	Compatibilidad con condiciones de frontera
Sí	No	Capacidad de generar caminatas aleatorias
Sí	No	Convergencia de η_s

Figura 6.1.0.0.1: Comparación general de los métodos numéricos.

Por otro lado hay consideraciones que se basan en las observaciones que se hacen en el capitulo (5), la tabla (6.1.0.0.2) sirve para presentar de manera concreta una comparación de

ambos métodos numéricos tomando en cuenta: el tamaño de la muestra aleatoria M que requieren los métodos numéricos para analizar la convergencia de los distintos tipos de errores y el tiempo que tardan en hacer las simulaciones cada uno de los métodos.

E-M	FDTD	
Sí	Sí	Convergencia de η_w para $M \leq 10^4$
Sí	No	Convergencia de η_s para $M \leq 10^4$
No	Sí	Convergencia de η para $M \leq 10^4$
Sí	Sí	Convergencia de η para $M \geq N^D$
No	Sí	η pequeño para $\Delta t \leq 2^{-7}$ en dimensión alta con $M \leq 10^4$
Sí	No	Tiempo de ejecución bajo en dimensión alta con $M \leq 10^4$ para $\Delta t \leq 2^7$

Figura 6.1.0.0.2: Comparación de los métodos numéricos considerando los parámetros y el tiempo de ejecución.

Esta tabla expone que el método de Euler-Maruyama se puede utilizar para aproximar la ecuación de Fokker-Planck en dimensión alta, sin embargo el error η de este método no converge para parámetros que implicarían un tiempo de ejecución corto o aceptable. Para parámetros razonables, cuyo tiempo ejecución es corto, no hay garantía de una convergencia en el error. Aún así sabemos que ambos métodos pueden aproximar la ecuación de Fokker-Planck, ya que el error η converge en dimensión alta para ambos métodos.

6.2 El Método para la Aplicación

El crecimiento exponencial de los elementos de la malla espacial en FDTD sugiere que: para simular el proceso estocástico en dimensión alta, la opción más viable es el método de E-M. Sin embargo, si se desea que este método brinde la misma calidad de información que se obtiene de FDTD, los resultados presentados en este trabajo sugieren que hace falta usar $M \geq N^D$. Lo cual es también un crecimiento exponencial al respecto de la dimensión, y la proyección realizada sugiere que resulta en un tiempo de ejecución que puede ser mayor, que el requerido para FDTD.

Sin embargo, frecuentemente no se requiere tanta información, en el sentido de que, no se requiere la posibilidad de hacer un histograma que reproduzca una curva suave. En este caso, una cantidad menor de caminatas, puede dar una descripción suficiente de la PDF correspondiente, y en este sentido, E-M resulta un método numérico más viable.

En los métodos numéricos siempre se sacrifica precisión por eficiencia y en este caso no es distinto. Aún si se consideran alternativas como paralelización del código y otras herramientas, se debe tener en mente que aproximar la ecuación de Fokker-Planck en dimensión 264 es

sumamente complicado. Es razonable utilizar el método de Euler-Maruyama para describir el comportamiento de la ecuación, sin embargo se ha de considerar que esto sólo se puede hacer para entender de manera general como se comporta la ecuación de Fokker-Planck, pues la precisión de tal descripción es muy costosa para cualquiera de los métodos numéricos.

Por último, es importante hacer énfasis en que aplicando el error η a los resultados obtenidos mediante el método de E-M, y el error débil a los resultados obtenidos mediante el método FDTD, se muestra que cuando se cuenta con una solución analítica, es posible comparar cuantitativamente la calidad de los resultados de ambos métodos. Mientras que, en el caso donde la solución analítica no está disponible, el uso de estos errores de manera cruzada, brinda una valoración de la validez de ambos resultados, lo cual resulta especialmente relevante en los casos no lineales, que son esperados en la aplicación que motiva este trabajo.

APPENDIX A

APÉNDICE DE PROBABILIDAD

En este apéndice se definen algunos conceptos importantes de probabilidad y cálculo de Itô que son de gran relevancia para sostener los conceptos definidos en el capítulo (2). En este apéndice se toman a los naturales como $\mathbb{N} - \{0\}$. Las referencias principales de este apéndice son *Oksendal* [32, Capítulos 1 y 3] y Grabinsky [14, Capítulos 1, 3 y 8].

A.1 Medida y Espacio de Probabilidad

Un espacio muestral, denotado por Ω, es el conjunto con todos los posibles resultados de un experimento aleatorio. Por ejemplo el espacio muestral de un volado es $\Omega = \{$"águila","sol"$\}$, también puede escribirse como $\Omega = \{$"A","S"$\}$ para simplificar la notación. Los espacios muestrales pueden no ser finitos.

Definición 20. *Una Sigma-álgebra (σ-álgebra) de un conjunto $\mathscr{X}$ no vacío, denotada por Σ, es una familia de conjuntos de $\mathscr{X}$ ($\Sigma \subset \mathscr{P}(\mathscr{X})$, donde $\mathscr{P}(\mathscr{X})$ es el conjunto de todos los subconjuntos posibles de $\mathscr{X}$) tal que:*

1. *Si $E \in \Sigma$ entonces $E^c \in \Sigma$, a esta propiedad se le conoce como cerradura bajo complementos*
2. *Si una cantidad a lo más numerable de conjuntos $E_1, E_2, E_3, \ldots \subset \mathscr{X}$ son tales que $E_1, E_2, E_3, \ldots \in \Sigma$ entonces $\bigcup_{i \in \mathbb{N}} E_i \in \Sigma$, a esta propiedad se le conoce como cerradura cerradura bajo unión numerable.*
3. *$\emptyset \in \Sigma$, ($\mathscr{X} \in \Sigma$).*

A los elementos de una σ-álgebra se les conoce como medibles. Las σ-álgebras triviales de un conjunto $\mathscr{X}$ son el conjunto potencia $\mathscr{P}(\mathscr{X})$ y el conjunto $\{\emptyset, X\}$. Una propiedad importante que

cumplen las σ-álgebras, es que la intersección de σ-álgebras es σ-álgebra, aunque esto no se demuestra en esta tesis.

Por otro lado, decimos que $(\mathscr{X},\Sigma)$ es un espacio medible si $\mathscr{X} \neq \emptyset$ y Σ es una σ-álgebra de $\mathscr{X}$. Una propiedad importante que cumplen estos espacios es que el producto cartesiano de espacios medibles es espacio medible.

Definición 21. *Si $(\mathscr{X},\Sigma)$ y $(\mathscr{Y},\Sigma')$ son espacios medibles entonces una función $f:\Sigma \to \Sigma'$ es medible relativa a Σ y Σ' (o simplemente decimos que f es Σ-medible) si para cualquier conjunto $E' \in \Sigma'$ se tiene que $f^{-1}(E') \in \Sigma$.*

Definición 22. *Si $(\mathscr{X},\Sigma)$ es un espacio medible, una función $\mu:\mathscr{X} \to \mathbb{R}$ es una medida en $(\mathscr{X},\Sigma)$ si cumple:*

1. $\mu(\emptyset) = 0$
2. $\mu(E) \geq 0$ *para todo* $E \in \Sigma$
3. μ *es* Σ*-aditiva, esto es, si* $E_1, E_2, E_3, \ldots \in \Sigma$ *son disjuntos entre sí entonces:*

$$\mu\Big(\bigcup_{i\in\mathbb{N}} E_i\Big) = \sum_{i\in\mathbb{N}} \mu(E_i)$$

Definición 23. *Sea P es una medida que va de $P:\mathscr{X} \to [0,1]$. A P se le conoce como medida de probabilidad si cumple:*

1. $P(\mathscr{X}) = 1$
2. $P(E) \leq 1$ *para todo* $E \in \Sigma$

Definición 24. *A la tripleta $(\Omega,\Sigma,\mathbb{P})$, donde Ω es un espacio muestral, Σ es una σ-álgebra de Ω y P es una medida de probabilidad la llamamos espacio de probabilidad y a los elementos de Σ se les llama eventos.*

A.2 $\mathbb{B}_{\mathbb{R}}$

La σ-álgebra de Borel es importante pues es la σ-álgebra usual de los números reales, $\mathbb{B}_{\mathbb{R}}$, para dar una idea de como es esta familia de conjuntos de $\mathbb{R}$ necesitamos definir la σ-álgebra generada por un conjunto (familia de conjuntos).

Definición 25. *Si $\forall A \subset \mathscr{P}(X)$ es una familia de conjuntos arbitraria de un conjunto X, existe una única σ-álgebra $S(A) \subset \mathscr{P}(X)$ tal que:*

1. $A \subset S(A)$

2. *Si S es una σ-álgebra contenida en $\mathscr{P}(X)$ tal que $A \subset S$ entonces $S(A) \subset S$*

A $S(A)$ es la σ-álgebra generada por A:

$$S(A) = \bigcap \{\Sigma \big| \Sigma \text{ es una } \sigma\text{-álgebra y } A \subset \Sigma\}$$

La σ-álgebra de Borel es la generada por los intervalos abiertos en $\mathbb{R}$, es decir, $\mathbb{B}_{\mathbb{R}} = S(I)$ donde I es el conjunto de los intervalos abiertos en $\mathbb{R}$. Un abierto en $\mathbb{R}$ puede ser la unión arbitraria de intervalos de la forma (a,b).

Otra manera típica de caracterizar a la σ-álgebra de Borel es mediante la familia

$$\mathbb{E} = \{[a,b) | a,b \in \mathbb{R}\}$$

Esto es porque una σ-álgebra es cerrada bajo uniones numerables y cerrada bajo complementos lo cual por leyes de DeMorgan resulta en ser cerrada bajo intersecciones numerables, así se puede probar que que $S(I) = S(\mathbb{E})$ ya que:

$$(a,b) = \bigcup_{n=1}^{\infty} [a + \frac{1}{n}, b) \qquad \text{y} \qquad [a,b) = \bigcap_{n=1}^{\infty} (a - \frac{1}{n}, b)$$

Definición 26. *Decimos que $f : (X_1, \Sigma_1) \to (X_2, \Sigma_2)$ es una función Borel-medible si (X_1, Σ_1) y (X_2, Σ_2) son espacios Borel-medibles.*

A.3 Integral con Respecto a una Medida

Sea (X, Σ) un espacio medible, una función Σ-simple $s : X \to \mathbb{R}$ es una combinación lineal de la forma:

$$s(x) = \sum_{i=1}^{n} a_i \mathbb{1}_{E_i}(x) \ ,$$

donde E_i es medible en $\mathbb{R}$, $a_i \in \mathbb{R}$ $\forall i \in \{1, 2, ...n\}$ y donde $\mathbb{1}$ es la función indicadora (o característica). Si $\{a_1, a_2, ...a_n\}$ son los valores de una función simple s entonces:

$$s(x) = \sum_{i=1}^{n} a_i \mathbb{1}_{A_i}(x) \ ,$$

donde $A_i = s^{-1}(a_i)$ para toda $i \in \{1, 2, ...n\}$. La cual es la representación canónica de s y cumple que las a_i's son distintas no nulas y que las A_i's son disjuntas.

Para $s(x) = \sum_{i=1}^{n} a_i \mathbb{1}_{A_i}(x)$ (en su representación canónica) definimos la integral con respecto a la medida μ como:

$$\int s d\mu = \sum_{i=1}^{n} a_i \mu A_i \ . \tag{A.1}$$

Si f es una función acotada no negativa medible sobre $E \in \Sigma$, se tiene que:

$$\int_E f\,d\mu = sup\left\{\int_E s\,d\mu : \quad s \leq f, \quad s \text{ es simple}\right\}. \tag{A.2}$$

Para una función más general con signo (que no es no negativa) f acotada medible sobre E se toma la siguiente descomposición:

$$f^+(x) = \begin{cases} f(x) & \text{si } f(x) > 0 \\ 0 & \text{en otro caso,} \end{cases}$$

$$f^-(x) = \begin{cases} -f(x), & \text{si } f(x) < 0 \\ 0, & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

Como $f = f^+ - f^-$ y además ambas funciones son no negativas sobre E se tiene:

$$\int_E f\,d\mu = \int_E f^+ - f^- d\mu = \int_E f^+\mu - \int_E f^- d\mu\,. \tag{A.3}$$

Esto define de manera general la integral de una función con respecto a una medida.

Definición 27. *Diremos que una función es μ-integrable sobre un conjunto E, si:*

$$\int_E f\,d\mu < \infty\,. \tag{A.4}$$

Cuando $\mu = \lambda$ es la medida de Lebesgue, diremos que f es Lebesgue integrable sobre E.

Definir de manera formal la medida de Lebesgue requiere de muchas definiciones adicionales así como de resultados que no son del todo triviales. Es por esta razón que a quienes les pueda interesar abordar esta medida pueden consultar el libro de Grabinsky en el cual se desarrollan las herramientas para entender y definir la medida de Lebesgue.

A.4 Integral de Itô

Hay algunos conceptos y teoremas que se necesitan para poder hablar de la integral con respecto a un movimiento browniano. La prueba de algunas propiedades y teoremas que se mencionan en esta sección se omiten pues son extensas y no forman parte del enfoque de esta tesis. Dichas demostraciones se pueden encontrar en el libro de Oksendal [32, Capítulos 1 y 3].

Definición 28. *Sea $\{\Sigma_t\}_{t\geq 0}$ una sucesión creciente ($\Sigma_n \subset \Sigma_{n+1}$) de σ-álgebras de un conjunto Ω. Un proceso $X(t,\omega) : [0,\infty) \times \Omega \to \mathbb{R}^n$ es Σ_t adaptado si $X(t,\omega)$ es Σ_t-medible $\forall t \geq 0$. Llamaremos a $\big(\Omega, \Sigma, (\Sigma_t)_{t\geq 0}, P\big)$ espacio de probabilidad filtrado.*

Para un espacio $\big(\Omega, \Sigma, (\Sigma_t)_{t\geq 0}, P\big)$ consideremos el siguiente espacio de funciones $\mathcal{V} = \mathcal{V}(s,T)$ (con $0 \leq s < T$), conocido como espacio de procesos simples. Diremos que $X \in \mathcal{V}$ si $X(t,\omega) : [0,\infty) \times \Omega \to \mathbb{R}$ cumple:

1. $X(t,\omega)$ es $\mathbb{B}_{[0,\infty)} \times \Sigma$-medible con $\mathbb{B}_{[0,\infty)}$ la σ-álgebra de Borel en el intervalo $[0,\infty)$.

2. $X(t,\omega)$ es Σ_t adaptado.

3. $E\big[\int_s^T X(t,\omega)^2 dt\big] < \infty$

Es razonable definir la integral para funciones simples que nos ayudarán a definir la integral de Itô de manera general. Llamaremos función simple a una función $\phi \in \mathcal{V}$ tal que:

$$\phi(t,\omega) = \sum_j e_j(\omega) \cdot \mathbb{1}_{[t_j,t_{j+1})}(t) \ ,$$

donde:

$$t_k = \begin{cases} k(2^{-n}) & \text{si } s \leq k(2^{-n}) \leq T \\ s & \text{si } k(2^{-n}) < s \\ T & \text{si } k(2^{-n}) > T. \end{cases}$$

La partición del dominio temporal en intervalos guarda una relación importante con la filtración $(\Sigma_t)_{t\geq 0}$ que se elige, sin embargo para los fines de esta tesis basta comprender la idea intuitiva, Σ_t es el flujo de la información de B_{t_k} hasta un tiempo t.

Es importante observar que la representación de una función simple no es única, para garantizar que la función ϕ no depende de las funciones e_j que se elijen se debe establecer una forma mínima o canónica de la función, para ello se puede aplicar el siguiente razonamiento. Si existe c.s. $j \in \{s, ..., T\}$ tal que $e_j = e_{j+1}$, se puede remplazar a $e_j \mathbb{1}_{[t_j,t_{j+1})} + e_{j+1}\mathbb{1}_{[t_{j+1},t_{j+2})}$ por $e_j \mathbb{1}_{[t_j,t_{j+2})}$. Esto se puede repetir hasta que no exista dicha j .

Como $\phi \in \mathcal{V}$, e_j es Σ_j-medible. Para estas funciones simples definimos la integral como:

$$\int_s^T \phi(t,\omega) dB_t(\omega) = \sum_j e_j(\omega) \cdot \big[B_{t_{j+1}} - B_{t_j}\big](\omega) \ ,$$

donde B_t es un movimiento browniano estándar (comienza en 0).

Hay tres propiedades importantes que cumple la integral de Itô con respecto a las funciones simples, estas se mencionan a continuación. Si $h, g \in \mathcal{V}$ son funciones simples y $a, b \in \mathbb{R}$:

1. Media cero
$$\mathbb{E}\big[\int_s^T h_t \, dB_t\big] = 0 \ ,$$

2. Isometría de Itô
$$\mathbb{E}\Big[\big(\int_s^T h_t \, dB_t\big)^2\Big] = \mathbb{E}\big[\int_s^T |h_t|^2 dB_t\big] \ ,$$

3. Linealidad
$$\int_s^T (ah_t + bg_t)dB_t = a\int_s^T h_t\, dB_t + b\int_s^T h_t dB_t \ .$$

Se puede demostrar la existencia de una función $f \in \mathcal{V}$ y funciones $\phi_n \in \mathcal{V}$ tales que:

$$E\Big[\int_s T|f-\phi_n|^2\Big] \to 0 \ .$$

La existencia de dichas funciones ϕ_n se debe a la de isometría de Itô, la prueba de esto no se presenta en esta tesis pero se puede encontrar en *Oksendal* [32, Capítulo 3].

Definición 29. *La integral de Itô para una función f es:*

$$\int_s^T f(t,\omega)dB_t(\omega) := \lim_{n\to\infty}\int_s^T \phi_n(t,\omega)dB_t(\omega)$$

La integral de Itô cumple algunas de las propiedades que cumple la integral usual, por ejemplo es lineal y se puede separar la integral de un intervalo dado en sub-intervalos. Por otro lado hay algunas propiedades de esta integral que no son intuitivas, por ejemplo:

$$\int_s^T f(\omega)^N dB_t(\omega) = \frac{f(T)^{N+1} - f(s)^{N+1}}{N+1} - \frac{1}{2}\int_s^T f(\omega)^{N-1} dB_t(\omega) \tag{A.5}$$

APPENDIX B

APÉNDICE DEL CEREBRO HUMANO Y LAS RESONANCIAS MAGNÉTICAS

En este apéndice se discute brevemente el uso de la ecuación de Fokker-Planck en la neurociencia. También se plantea de manera general lo que son las resonancias magnéticas y como se hace la parcelación del cerebro en regiones con las cuales se generan las series de tiempo que se estudian en esta tesis.

B.1 La Ecuación de Fokker-Planck y el Cerebro

Las células vivas tienen una tensión eléctrica (voltaje) entre el interior y el exterior de sus membranas, a dicha diferencia de potencial se le conoce como potencial de membrana. Las membranas de algunas células tienen canales de proteínas que permiten el flujo de iones a través de ellas, estos canales reciben el nombre de canales iónicos.

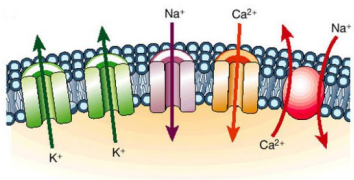

Figura B.1.0.0.1: Canales iónicos

Las neuronas son células que viven en un ambiente ruidoso pues los canales de iones abren y cierran de manera aleatoria y esto se puede interpretar como ruido [11, Capítulo 10]. Una razón por la cual se utiliza la ecuación de Fokker-Planck en la neurociencia es que el cerebro humano no puede ser descrito de manera determinista por factores que no lo permiten como el ruido que

hay en el ambiente en el que viven las neuronas.

La ecuación de Fokker-Planck es utilizada por distintos autores (ver artículos, [23] y [8]) para modelar el potencial de las membranas, más aún en el artículo *Dynamic models of large-scale brain activity* [3] Michael Breakspear señala a la ecuación de Fokker-Planck como uno de dos esquemas opuestos para modelar aproximaciones de la dinámica de neuronas:

- Cuando la coherencia en la escala de un sistema es suficientemente débil como para ignorar los impulsos eléctricos individuales tiene sentido utilizar la ecuación de Fokker-Planck.
- Recíprocamente cuando la coherencia es suficientemente fuerte la varianza se puede considerar pequeña y constante, de esta manera el modelo indicado es el de Morris-Lecar.

Es evidente que la ecuación de Fokker-Planck es relevante y útil en la neurociencia y sus aplicaciones. Sin embargo en este trabajo no se utiliza la ecuación de Fokker-Planck para modelar el potencial de neuronas pues se consideran regiones de neuronas y la correlación que hay entre dichas regiones.

B.2 Sobre las Resonancias Magnéticas y la Parcelación del Cerebro

La imagenología por resonancia magnética (MRI, *Magnetic Resonance Imaging*), funciona con los principios físicos de la resonancia magnética nuclear, donde bajo un campo magnético potente es posible extraer la señal (por lo general de protones de hidrógeno) de manera tomográfica a través del cuerpo humano de una manera no invasiva, ver artículo [17].

Se pueden registrar cambios hemodinámicos cerebrales que acompañan la activación neuronal y realizar una evaluación funcional de las regiones responsables de la sensorialidad, motricidad, cognición y procesos afectivos en cerebros normales y patológicos, ver artículo [7].

La MRI además de reflejar la estructura interna del cerebro permite medir cambios metabólicos por medio del estado magnético de la hemoglobina (Hb), mediante un estudio fMRI (*functional MRI*), es decir un estudio temporal de MRI. Cuando la Hb pasa de un estado de oxi-hemoglobina a deoxi-hemoglobina ocurre un cambio local apreciable en la señal de MRI, que se conoce como nivel dependiente de oxigenación de la sangre (o efecto ***BOLD***, *Blood Oxigenation Level Dependent*), ver artículo [31], esto permite observar distintas áreas del cerebro que se encuentran activas en un momento dado.

Las funciones complejas del sistema nervioso son consecuencia de la interacción entre redes de neuronas y no el resultado de las características específicas a cada neurona de manera individual,

ver artículo [26]). El cerebro es una red compleja con organización macroscópica a nivel de áreas funcionales y núcleos subcorticales, ver artículo [27]. Con esto en mente es que en esta tesis se asume que una estrategia valida para estudiar la actividad del cerebro es a través de regiones de neuronas. Dicha división en regiones se realiza mediante un sistema de parcelación del cerebro humano que esta basada en la anatomía funcional de la corteza cerebral y se aplica al análisis de imágenes de resonancias magnéticas, ver artículo [29].

Las 264 regiones consideradas para la aplicación de esta tesis son los nodos de una red rs-fcMRI que se estudia en el artículo *Functional network organization of the human brain*, ver artículo [27]. Estas regiones se tomaron en cuenta para el desarrollo de este modelo y su posible aplicación al trabajo doctoral de María del Lucero Pacheco Blas.

B.3 Sobre las Series de Tiempo

En esta tesis se utiliza la correlación que hay entre series de tiempo correspondientes a regiones del cerebro, esta metodología también es utilizada en el articulo *Functional Magnetic Resonance Imaging: A new technique with implications for psychology and psychiatry* [20], en el cual Friston hace un análisis correlacional de datos longitudinales recopilados a lo largo de un intervalo de tiempo en un solo sujeto (o con la media de varios sujetos, en un lapso fijo bajo los mismos estímulos). El objetivo de estos análisis es descubrir el perfil característico o patrón fisiológico cerebral que define una neuropatología o un estado particular del cerebro. La interpretación estos perfiles distribuidos, ciertamente depende del concepto de conectividad funcional, pero no son medidas directas de conectividad funcional, con lo cual concluye que las correlaciones temporales no pueden ser medidas sin una serie de observaciones en el tiempo.

Para obtener las series de tiempo de las resonancias magnéticas se utiliza el software FSL que requiere de datos rs-fcMRI o datos fMRI. Durante el proyecto HIM/2016/016 SSA 1251 que se menciona en el capitulo (1) se obtuvieron datos que se utilizaron durante este trabajo. Sin embargo estos resultados se omiten para ser utilizados en otros trabajos.

FSL, ver artículo [19], es una herramienta que nos permite cargar la información que se obtiene del resonador esencialmente para tener series de tiempo pre-procesadas con las que es posible trabajar. El pre-procesamiento consiste a grandes rasgos en filtrar las frecuencias bajas y altas para eliminar ruido; hacer un filtro espacial para homogeneizar la calidad de la imagen; corregir las diferencias temporales para reconstruir la información correspondiente a cada voxel; escoger una parcelación del cerebro y segmentarlo para finalmente obtener una serie de tiempo por cada región de interés. Este pre-procesamiento es necesario para que la información de las series de tiempo sea consistente tanto de manera temporal como espacial y para que dicha información

tenga la menor cantidad de ruido posible.

B.4 El estudio de las series de tiempo

Una estrategia estándar para obtener información de las resonancias magnéticas, es calculando la matriz de correlación de las mismas y luego aplicar una función umbral para filtrar la información de y así generar una topología de red más general, de esta manera se logra estudiar las propiedades de una red basada en la actividad de las regiones consideradas.

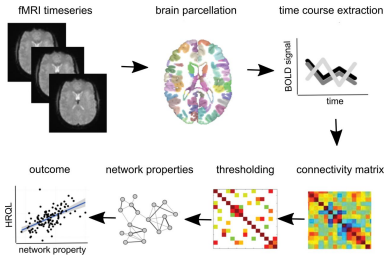

Figura B.4.0.0.1: Diagrama del procesamiento de las resonancias

Sin embargo, para este trabajo no se desea seguir la misma estrategia. Sin aplicar un umbral a la matriz de correlaciones, esta se pasa como parámetro a la ecuación de Fokker-Planck. El término de arrastre de esta matriz determina el campo vectorial que seguirá la densidad de probabilidad descrita por la ecuación. Así la matriz de correlaciones determina un campo vectorial que permite observar la manera en la que se comportan las regiones según la influencia que hay entre ellas.

Este es un modelo inicial de uno más general que deberá considerar ecuaciones más generales que las que se utilizan en esta tesis. Además, en el caso general se puede llegar a utilizar un término de Fisher que permita a la densidad de probabilidad cambiar su difusión. Dicho modelo general es la idea que el Dr. Pablo Padilla Longoria, del Instituto de Investigaciones en Matemáticas Aplicadas, compartió con nosotros y en la cuál se basó este trabajo.

APPENDIX C

SOBRE LAS ECUACIONES DIFERENCIALES ESTOCÁSTICAS

En este apéndice se hará una comparación entre las ecuaciones de Langevin y las SDE's del cálculo de Itô. Además se presenta una derivación hecha por de Einstein de un caso particular de la ecuación de Fokker-Planck. Este apéndice tiene como referencia el libro Gardiner, *Gardiner* [12].

C.1 Einstein y el Movimiento Browniano

Louis Bachelier modeló por primera vez (en 1900) el movimiento browniano en su tesis doctoral titulada Teoría de la especulación (*Théorie de la spéculation*) [2], la meta de este trabajo era estudiar la dinámica de la bolsa (*Stock Exchange*) utilizando teoría de la probabilidad. Sin embargo el problema de movimiento browniano, planteado por Brown en 1827, no fue claro hasta 1905 año en el cual Einstein publicó una explicación en su artículo *Concerning the motion, as required by the molecular-kinetic theory of heat, of particles suspended in liquids at rest* [9].

Dos puntos importantes en la publicación de Einstein para el problema del movimiento browniano son:

1. "El movimiento es causado por una frecuencia excesiva de impactos al grano de polen por parte de las moléculas del liquido (en el que está suspendido), cuyo movimiento es incesable."

2. "El movimiento de las partículas es suficientemente complicado como para que sus efectos en el grano de polen se puedan describir únicamente de manera probabilista, en términos de la frecuencia estadística de impactos independientes."

Además hizo algunas conjeturas de gran utilidad con respecto al movimiento browniano, por ejemplo:

"Se debe asumir que cada partícula (de manera individual) tiene un movimiento independiente del movimiento de las demás partículas; también se debe considerar que el movimiento de una misma partícula es independiente en distintos intervalos de tiempo, siempre y cuando dichos intervalos sean suficientemente grandes, denotados por τ."

En su trabajo Einstein derivó una ecuación que dio lugar a las ecuaciones de Langevin que se plantean en la siguiente sección, la derivación de esta ecuación la hizo de la siguiente manera:

Si hay n partículas suspendidas en un líquido. En un intervalo de tiempo τ, las coordenadas x_i de la cada partícula individual incrementarán en una cantidad Δ (donde Δ toma un valor distinto, positivo o negativo, para cada partícula). Habrá una cierta ley de frecuencia para Δ; el número dn de partículas que sufran un cambio durante Δ y $\Delta + d\Delta$ esta dado por:

$$dn = n\phi(\Delta)d\Delta, \tag{C.1}$$

donde

$$\int_{\infty}^{\infty} \phi(\Delta)d\Delta = 1 \tag{C.2}$$

y ϕ es distinto de cero para valores pequeños de Δ, además es una función par, es decir

$$\phi(\Delta) = \phi(-\Delta) \tag{C.3}$$

Sea $v = f(t,x)$ la cantidad de partículas por unidad de volumen. A partir de la definición de ϕ, podemos encontrar la cantidad de partículas entre dos planos perpendiculares al eje x que pasan por los puntos x y $x + dx$:

$$f(t+\tau,x)dx = dx\int_{\infty}^{\infty} f(t,x+\Delta)\phi(\Delta)d\Delta. \tag{C.4}$$

Como τ es muy pequeña podemos hacer

$$f(t+\tau,x)dx = f(t,x) + \tau\frac{\partial f}{\partial t}.$$

Tomando la expansión en serie de Taylor de $f(t,x+\Delta)$:

$$f(t,x+\Delta) = f(t,x) + \Delta\frac{\partial f(t,x)}{\partial x} + \frac{\Delta^2}{2}\frac{\partial^2 f(t,x)}{\partial x^2} + \dots .$$

Podemos usar esta serie con la integral, pues únicamente pequeños valores de Δ afectan a esta ecuación. Entonces tenemos

$$f + \frac{\partial f}{\partial \tau}\tau = f\int_{\infty}^{\infty}\phi(\Delta)d\Delta + \frac{\partial f}{\partial x}\int_{\infty}^{\infty}\Delta\phi(\Delta)d\Delta + \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\int_{\infty}^{\infty}\frac{\Delta^2}{2}\phi(\Delta)d\Delta.$$

Por (C.3), los términos pares desaparecen, considerando entonces los términos restantes y (C.2) obtenemos:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}..., \tag{C.5}$$

donde

$$D = \frac{1}{\tau}\int_{\infty}^{\infty}\frac{\Delta^2}{2}\phi(\Delta)d\Delta.$$

De manera que (C.5) es un caso particular de la ecuación de Fokker-Planck y D es el coeficiente de difusión. Otra observación importante es que la ecuación (C.4) es un caso especial de la ecuación de Chapman-Kolmogorov.

C.2 Ecuaciones de Langevin

Tiempo después del trabajo original de Einstein, Langevin dio una derivación distinta a la cual el se refirió como, " infinitamente más simple ". Esto resultó en el primer ejemplo de una ecuación diferencial estocástica.

"Por la mecánica estadística sabemos que la media de la energía cinética de la partícula browniana debe alcanzar un valor:

$$\langle\frac{1}{2}mv^2\rangle = \frac{1}{2}kQ",$$

valores definidos en la ecuación (3.14), (Einstein y Smoluchowski llegaron a esta conclusión por distintos medios). Hay dos fuerzas que actúan sobre la partícula de masa m:

1. Un arrastre viscoso: asumiendo que este esta dado por la misma ecuación que en la hidrodinámica microscópica, $-6\pi\eta r\, dx/dt$, donde η es la viscosidad y r el diámetro de la partícula, asumiendo que es esférica.

2. Una fuerza de fluctuante Z que representa los impactos incesantes a la partícula browniana de las moléculas del liquido. Esto es lo único que se conoce de este echo además de que debería tomar un valor positivo o negativo con la misma probabilidad.

Así, la ecuación de movimiento que se tiene para describir la posición de la partícula esta dada por la ley de Newton, de la siguiente manera:

$$m\frac{\partial^2 x}{\partial t^2} = -6\pi\eta r\frac{\partial x}{\partial t} + Z. \tag{C.6}$$

La ecuación (C.6) da lugar a las ecuaciones de Langevin que de forma simple se escriben como:

$$\frac{dx}{dt} = \alpha(t,x) + \beta(t,x)\xi(t), \tag{C.7}$$

donde x es la variable de interés, α y β son funciones dadas y ξ es el termino aleatorio. Para $t \neq t'$ se tiene que los pasos de ξ son independientes. También se requiere que $\langle \xi(t) \rangle = 0$, pues cualquier media distinta de cero puede ser tomada como parte de α, por lo cual también se requiere que:

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \delta(t - t'),$$

para no tener correlación entre distintos tiempos.

Referencias

[1] Alvarez, M.A.G. *Introducción a la teoría de la probabilidad, Primer Curso*. Fondo de Cultura Económica (2005)

[2] Bachelier, L. *Theory of speculation: The origins of modern finance*, pág. 47 (1900)

[3] Breakspear, M. Dynamic Models of large-scale brain activity. *Nature Neuroscience* **20**(3):340–352 (March-2017)

[4] Brooks, D.G. *The Sampling Distribution and Central Limit Theorem*. CreateSpace Independent Publishing Platform 2012-12-31 (2012)

[5] Burden, R. *Análisis Numérico*. Ed. Thomson Learning (2002)

[6] Chirikjian, G.S. *Stochastic Models, Information Theory, and Lie Groups, Volume 1, Classical Results and Geometric Methods*. American Society of Plant Biologist (2009)

[7] David, A., Blamire, A., y Breiter, H. Functional Magnetic Resonance Imaging: A new technique with implications for psychology and psychiatry. *British Journal of Psychiatry* **164**(1):2–7 (1994)

[8] Deniz, T. y Rotter, S. Solving the two-dimensional Fokker-Planck equation for strongly correlated neurons. *Physucal Review E* **95**(1):012412 (January-2017)

[9] Einstein, A. On the Motion of Small Particles Suspended in Liquids at Rest Required by the Molecular-Kinetic Theory of Heat. *Annalen der Physik* **17**:549–560 (1905)

[10] Evance, L. *Partial Differential Equations*. American Mathematical Society, Graduate Studies in Mathematics Volume 19. (2010)

[11] G. Bard Ermentrout, D.H.T. *Mathematical Foundations of Neuroscience*. Springer (2010)

[12] Gardiner, C.W. *Handbook Stochastic Methods for Physics, Chemistry and the Natural Sciences*. 3ª edición. Springer (2004)

[13] Giordano, C.M. Ecuaciones Diferenciales Parciales (2017)

[14] Grabinsky, G. *Teoría de la medida*. Las prensas de ciencias (2009)

[15] GREGORY F. LAWLER, V.L. *Random Walk: A Modern Introduction*. Cambridge University Press (2010)

[16] HIGHAM, D.J. An Algorithmic Introduction to Numerical Simulation of Stochastic Differential Equations. *SIAM Review* **43**(3):525–546 (2001)

[17] HORNAK, J.P. *The basics of mri*. http://www.cis.rit.edu/htbooks/mri/index.html (2008)

[18] IACUS, S.M. *Simulations and Interference for Stochastic Differential Equations With R Examples*. Springer (2008)

[19] JENKINSON, M. Y BECKMANN. Fsl. *Neuroimage* **62**(2):782–790 (2012)

[20] K. J. FRISTON, FRITH, L. Y FRACKOWIAK. Functional Connectivity: The Principal-Component Analysis of Large (PET) Data Sets. *Journal of Cerebral Blood Flow & Metabolism* **13**(1):5–14 (1993). PMID: 8417010

[21] KARATZAS, I. Y SHREVEN, S.E. *Brownian Motion and Stochastic Calculus*. Springer-Verlag (1991)

[22] KNIGHT, F.B. *Essentials of Brownian Motion and Diffusion*. American Mathematical Society (1981)

[23] L. M. HARRISON, O.D. Y FRISTON, K.J. Stochastic models of neuronal dynamics. *Phil. Trans. R. Soc. B* (360):1075–1091 (May 2005)

[24] LEVEQUE, R. *Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations*. SIAM (2007)

[25] LIE, K.A. A dimensional splitting method for nonlinear equations with variable coefficients. *Preprint. Mathematics* (17) (November 18 1997)

[26] MACKENZIE-GRAHAM Y BOLINE, A. *Brain Atlases and Neuroanatomic Imaging*, págs. 183–194. Humana Press (2007)

[27] POWER, J.D., COHEN, A.L., Y NELSON, S. Functional network organization of the human brain. *Neuron* **72**(4):012412 (2011)

[28] PRIVAULT, N. *Notes on Stochastic Finance*, pág. 1049 (2020)

[29] RADEMACHER J, GALABURDA AM, K.D. Human cerebral cortex: localization, parcellation, and morphometry with magnetic resonance imaging. *NeuroImage* **4**(4):352–374 (Fall-1992)

[30] RISKEN, H. *The Fokker Planck equation: Methods of Solution and Applications*. Springer-Verlag (1984)

[31] TABUENCA, Z.G. *Asimetría en conectividad funcional cerebral de niños y adolescentes sanos: influencia de la edad, sexo y correlatos cognitívos*. Tesis Digitales. UNAM-DGB (2016)

[32] ØKSENDAL, B. *Stochastic Differential Equations, An Introduction With Applications*. Springer (2003)