Modelagem computacional de processos estocásticos

Mendeli H. Vainstein[1]

[1]Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil

Semestre 2021-2

1. **Variáveis aleatórias contínuas**
   - Função característica
2. **Variáveis aleatórias discretas**
   - Função geratriz
3. **Mudança de variável**
4. **Distribuição conjunta**

Função característica

- É a transformada de Fourier de uma densidade de probabilidade
- Útil para calcular momentos de distribuições

$$g(k) = \int \rho(x) e^{ikx} dx = \langle e^{ikx} \rangle$$

- $g(0) = \int \rho(x) dx = 1.$
- $|g(k)| \leqslant 1$

Sua expansão em série (quando existe) é dada por

$$g(k) = \int \rho(x) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ikx)^n}{n!} dx = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} \int x^n \rho(x) dx \quad (1)$$

$$= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} \mu_n \quad (2)$$

Função característica

Por outro lado, sua série de Taylor, se existe, é

$$g(k) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[\frac{d^n g(k)}{dk^n} \right]_{k=0} k^n.$$

Combinando este resultado com o anterior, obtemos

$$\mu_n = i^{-n} \left[\frac{d^n g(k)}{dk^n} \right]_{k=0}$$

- Se $g(k)$ não é diferenciável em $k = 0$, um ou mais momentos podem não estar definidos.

Às vezes é útil expressar a função $g(k)$ em termos dos cumulantes, κ_n, definidos por

$$g(k) = \exp\left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} \kappa_n \right) \tag{3}$$

Ver código Julia com exemplo da função característica.

Cumulantes e momentos

Das expansões em momentos, eq. (2), e cumulantes, eq. (3), obtemos

$$\begin{aligned}
\kappa_1 &= \mu_1 = \langle x \rangle \quad \text{(média)} \\
\kappa_2 &= \mu_2 - \mu_1^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad \text{(variância)} \\
\kappa_3 &= \mu_3 - 3\mu_1\mu_2^2 + 2\mu_1^3 = \langle x^3 \rangle - 3\langle x \rangle \langle x^2 \rangle + 2\langle x \rangle^3 \\
\kappa_4 &= \mu_4 - 4\mu_3\mu_1 - 3\mu_2 + 12\mu_2\mu_1^2 - 6\mu_1^4
\end{aligned}$$

- Se os cumulantes de mais alta ordem tenderem a zero rapidamente, pode-se obter uma boa aproximação de $g(k)$ usando apenas os primeiros termos na expansão da eq. (3).

Curtose e coeficiente de assimetria

- Coeficiente de assimetria (*skewness*)

$$\gamma_1 = \frac{\kappa_3}{\kappa_2^{3/2}}$$

- Curtose (*curtosis*)

$$\gamma_2 = \frac{\kappa_4}{\kappa_2^2}$$

$\Rightarrow$ Para distribuições simétricas, os momentos ímpares são nulos, portanto $\gamma_1 \equiv 0$ e

$$\gamma_2 = \frac{\mu_4 - 3\mu_2}{\mu_2^2}$$

Função geratriz

$\langle k \rangle = \sum k p_k$

$G'(z) = \sum_{n=0}^{\infty} k p_k z^{k-1} \Big)_{z=1}$

$$G(z) = \sum_{k=0}^{\infty} p_k z^k.$$

- Conveniente para distribuições de probabilidade com valores discretos $k \in \{0, 1, 2 \ldots\}$
- Converge pelo menos para $-1 \leqslant z \leqslant 1$.
- Útil para cálculo de momentos:

$$\left.\frac{dG(z)}{dz}\right|_{z=1} = G'(1) = \sum_{k=0}^{\infty} k\, p_k = \langle k \rangle$$

$$G''(1) = \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1)\, p_k = \langle k^2 \rangle - \langle k \rangle$$

Ex. 1.18: Função geratriz da Binomial

$$G(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \binom{N}{k} a^k b^{(N-k)} z^k$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \binom{N}{k} b^{(N-k)} (az)^k = (az+b)^N, \quad \text{com } a+b=1.$$

$$G'(z)\Big|_{z=1} = \frac{d}{dz}(az+b)^N\Big|_{z=1} = N(az+b)^{N-1}a\Big|_{z=1} = Na(a+b)^{N-1} = Na \rightarrow \boxed{\langle k \rangle = Na}$$

$\Big\{ d/dz$

$$G''(z)\Big|_{z=1} = \frac{d^2}{dz^2}(az+b)^N\Big|_{z=1} = Na(N-1)(az+b)^{N-2}a\Big|_{z=1} = Na^2(N-1)(a+b)^{N-2}$$

$$= Na^2(N-1) = Na(Na-a) = Na[Na-(1-b)]$$

$$= Na[Na-1+b] = (Na)^2 - Na + Nab$$

$$= \langle k \rangle^2 - \langle k \rangle + Nab$$

Ex. 1.18: Função geratriz da Binomial (cont.)

$$G''(1) = \langle n\rangle^2 - \langle n\rangle + Nab$$

$$G''(1) = \langle n^2\rangle - \langle n\rangle$$

$$\langle n\rangle^2 - \cancel{\langle n\rangle} + Nab = \langle n^2\rangle - \cancel{\langle n\rangle}$$

$$\boxed{\langle n^2\rangle - \langle n\rangle^2 = Nab}$$

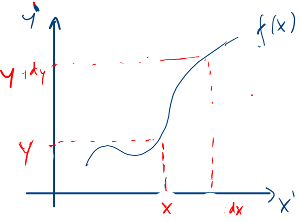
é variância

$$\mu_2 = \langle n^2\rangle = Nab - N^2a^2$$

$$= Na(b - Na)$$

Mudança de variável

Sejam x e y variáveis aleatórias, tais que $y = f(x)$, e sejam $\rho_1(x)$ e $\rho_2(y)$ suas densidades de probabilidade, respectivamente.



* probabilidade de gerar $x' \in [x, x+dx]$

$$P(x \in [x, x+dx]) = \rho_1(x)\, dx$$

* prob. de gerar $y' \in [y, y+dy]$

$$P(y \in [y, y+dy]) = \rho_2(y)\, dy$$

→ Como $y = f(x)$, a partir do momento que x foi definido, y está determinado.

$$\Rightarrow \quad \rho_1(x)\, dx = \rho_2(y)\, dy$$

Mudança de variável

Se x está uniformemente distribuída em $[0,1]$,

$$\rho_1(x) = \begin{cases} 1 , & x \in [0,1] \\ 0 , & \text{caso contrário} \end{cases}$$

$$\int_0^x \rho_1(x')\, dx' = \int_{y_0}^{y} \rho_2(y')\, dy'$$

$$\int_0^x dx' = \int_{y_0}^{y} \rho_2(y')\, dy'$$

$x - 0 = F_2(y)$, $F_2(y)$ é a densidade de probabilidade acumulada de y.

$$x = F_2(y)$$

$$\Rightarrow \boxed{y = F_2^{-1}(x)}$$ função inversa de F_2.

Mudança de variável - rigorosamente

A função característica da variável aleatória y é

$$g_2(k) = \langle e^{iky} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dy\, e^{iky} \rho_2(y) dy.$$

Sua função distribuição pode ser escrita como a transformada de Fourier inversa de $g_2(k)$

$$\rho_2(y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{-iky} g_2(k),$$

de onde se obtém

$$\begin{aligned}
\rho_2(y) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{-iky} \int_{-\infty}^{\infty} dy'\, e^{iky'} \rho_2(y') \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dy' \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{-ik(y-y')} \right] \rho_2(y') \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dy' \delta(y - y') \rho_2(y')
\end{aligned}$$

Ver código Julia sobre delta de Dirac

Mudança de variável - rigorosamente

Por outro lado, como temos que $y = f(x)$, podemos escrever

$$g_2(k) = \langle e^{iky} \rangle = \langle e^{ikf(x)} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{ikf(x)} \rho_1(x) dx.$$

Substituindo na transformada de Fourier inversa

$$\begin{aligned} \rho_2(y) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{-iky} g_2(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{-iky} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{ikf(x)} \rho_1(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{-ik(y-f(x))} \right] \rho_1(x), \end{aligned}$$

portanto

$$\boxed{\rho_2(y) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \delta(y - f(x)) \rho_1(x)}$$

Distribuição conjunta

Sejam x e y variáveis aleatórias. A probabilidade de encontrar $x \in [a,b]$ e $y \in [c,d]$ é

$$P(x \in [a,b], y \in [c,d]) = \int_a^b dx \int_c^d dy\, \rho(x,y),$$

onde $\rho(x,y)$ é a *densidade conjunta de probabilidade* de x e y, tal que

$$\rho(x,y) \geqslant 0$$

$$\int\int \rho(x,y)\, dx\, dy = 1$$

Podem-se obter as densidades marginais por integração:

$$\rho_1(x) = \int \rho(x,y) dy$$

$$\rho_2(y) = \int \rho(x,y) dx$$

As variáveis x e y são **independentes** se

$$\rho(x,y) = \rho_1(x)\rho_2(y)$$

Distribuição conjunta

Dado $\rho(x,y)$, a distribuição $\rho_3(z)$ da variável aleatória z, tal que $z = f(x,y)$ é

$$\rho_3(z) = \iint \delta(z - f(x,y))\rho(x,y)dx\,dy,$$

de forma análoga ao caso com um única variável aleatória.
Se duas variáveis u e v são funções de x e y

$$\begin{aligned} u &= f_1(x,y) \\ v &= f_2(x,y) \end{aligned}$$

então

$$\rho_{12}(\overset{u}{\cancel{x}}, \overset{v}{\cancel{y}}) = \iint \delta(u - f_1(x,y))\delta(v - f_2(x,y))\rho(x,y)dx\,dy$$

$\Rightarrow$ Ex.: Método de Box-Muller para gerar uma distribuição gaussiana a partir de duas variáveis uniformemente distribuídas (ver p. 31 do livro texto)

Correlação

Os momentos conjuntos são definidos de maneira análoga ao caso de uma variável única

$$\langle x^m y^n \rangle = \iint dx\, dy\, x^m y^n \rho(x,y)$$

Dois momentos conjuntos comumente utilizados em física são

- Covariância

$$\mathrm{Cov}(x,y) = \langle (x - \langle x \rangle)(y - \langle y \rangle) \rangle = \langle x\, y \rangle - \langle x \rangle \langle y \rangle$$

- Correlação

$$\mathrm{Cor}(x,y) = \frac{\langle (x - \langle x \rangle)(y - \langle y \rangle) \rangle}{\sigma_x \sigma_y} = \frac{\langle x\, y \rangle - \langle x \rangle \langle y \rangle}{\sigma_x \sigma_y},$$

  onde σ_x e σ_y representam os desvios padrões de x e y, respectivamente.

Propriedades da correlação

- É adimensional
- $\text{Cor}(x,y) = \text{Cor}(y,x)$
- $-1 \leqslant \text{Cor}(x,y) \leqslant 1$
- $\text{Cor}(x,x) = 1$; $\text{Cor}(x,-x) = -1$
- $\text{Cor}(ax+b, cy+d) = \text{Cor}(x,y)$, se $a, c \neq 0$
- Pode ser estendida para um número arbitrário de variáveis conjuntas

Para duas variáveis **independentes** x e y

- $\rho(x,y) = \rho_1(x)\rho_2(y)$
- $\langle xy \rangle = \langle x \rangle \langle y \rangle$
- $\langle (x+y)^2 \rangle - \langle (x+y) \rangle^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 + \langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2$
- $\text{Cor}(x,y) = 0$
  Mas, $\text{Cor}(x,y) = 0$ não significa sempre que x e y são independentes.

Referências

1. T. Tomé, M. J. de Oliveira, *Dinâmica estocástica e irreversibilidade*, 2^a edição, EdUSP, São Paulo, 2014. ISBN13: 9788531414800
   `https://www.edusp.com.br/livros/dinamica-estocastica-e-irreversibilidade/`
2. L. E. Reichl, *A Modern Course in Statistical Physics*, 2^a edição, Wiley-Interscience, New York, 1998. ISBN13: 9780471595205
   Link para 4^a edição:
   `https://onlinelibrary.wiley.com/doi/book/10.1002/9783527690497`
3. H. J. Weber, G. B. Arfken, *Essential Mathematical Methods for Physicists*, Academic Press, 2003.
4. E. W. Weisstein, "Delta Function." From MathWorld–A Wolfram Web Resource.
   `https://mathworld.wolfram.com/DeltaFunction.html`