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. **Sequência de variáveis independentes**
   - Soma de variáveis independentes

Soma de 2 variáveis independentes

Seja $y = x_1 + x_2$,

- x_1, x_2 variáveis aleatórias independentes.

Sua função característica é dada por

$$G(k) = \int e^{iky} \rho(y)\, dy,$$

onde

$$\begin{aligned}\rho(y) &= \iint \delta(y - (x_1 + x_2))\, \boldsymbol{\rho_{12}(x_1, x_2)}\, dx_1 dx_2 \\ &= \iint \delta(y - (x_1 + x_2))\, \boldsymbol{\rho_1(x_1)\rho_2(x_2)}\, dx_1 dx_2,\end{aligned}$$

~~independência~~ independência

Soma de variáveis independentes

Substituindo a expressão de $\rho(y)$ no cálculo da função característica

$$
\begin{aligned}
G(k) &= \int dy\, e^{iky} \iint dx_1 dx_2 \delta(y - x_1 - x_2)\rho_1(x_1)\rho_2(x_2) \\
&= \iint dx_1 dx_2\, \rho_1(x_1)\rho_2(x_2) \int dy\, e^{iky}\delta(y - x_1 - x_2) \\
&= \iint dx_1 dx_2\, \rho_1(x_1)\rho_2(x_2) e^{ik(x_1+x_2)} \\
&= \int dx_1 \rho_1(x_1) e^{ikx_1} \int dx_2 \rho_2(x_2) e^{ikx_2} \\
&= g_1(k) g_2(k)
\end{aligned}
$$

Propriedade

Analogamente, se

$$y = x_1 + x_2 + \cdots + x_N = \sum_{n=1}^{N} x_n, \text{ então}$$

$$\boxed{G(k) = g_1(k) g_2(k) \cdots g_N(k) = \prod_{n=1}^{N} g_n(k)}$$

Cumulantes

Relembrando a expressão que define os cumulantes κ_n

$$g_j(k) = \exp\left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!}\kappa_n^{(j)}\right),$$

Para $y = x_1 + x_2 + \cdots + x_N$, temos

definição dos cumulantes

$$G_y(k) = g_1(x)g_2(k)\cdots g_N(k) = \exp\left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!}\kappa_n\right)$$

$$= \exp\left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!}\kappa_n^{(1)}\right)\exp\left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!}\kappa_n^{(2)}\right)\cdots\exp\left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!}\kappa_n^{(N)}\right)$$

$$= \exp\left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!}\kappa_n^{(1)} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!}\kappa_n^{(2)} + \cdots\right)$$

$$= \exp\left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!}\left[\kappa_n^{(1)} + \kappa_n^{(2)} + \cdots + \kappa_n^{(N)}\right]\right)$$

Cumulantes

Finalmente, tomando o logaritmos de ambos os lados

$$\ln(G(k)) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} \left[\kappa_n^{(1)} + \kappa_n^{(2)} + \cdots + \kappa_n^{(N)}\right] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} \kappa_n.$$

Para calcular os cumulantes da variável y, basta analisar cada potência de k, de modo que

$$\kappa_n = \kappa_n^{(1)} + \kappa_n^{(2)} + \cdots + \kappa_n^{(N)} = \sum_{j=1}^{N} \kappa_n^{(j)}$$

- $\underline{\kappa_1 = \mu_1}$

$$\langle y \rangle = \sum_{j=1}^{N} \langle x_j \rangle$$

- $\underline{\kappa_2 = \mu_2 - \mu_1^2}$

$$\langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2 = \sum_{j=1}^{N} \left[\langle x_j^2 \rangle - \langle x_j \rangle^2\right]$$

Ex. 2.1 - Ensaios de Bernoulli

- N ensaios de Bernoulli independentes
- Ex. Lançamento de moeda (cara$\to 1$ ou coroa$\to 0$)
- Probabilidade de sucesso (cara): p
- Probabilidade de falha (coroa): $q = 1 - p$

Dados N ensaios, qual é a probabilidade de ocorrerem l caras?

$$\underbrace{\boxed{1|0|1|1|0|\ldots|1}}_{N}$$

Probabilidade de l caras e $N-l$ coroas

$$p^l q^{N-l}$$

Dado que uma cara (coroa) é indistinguível de qualquer outra, tenho que descontar das $N!$ formas de ordenar N objetos indistinguíveis as permutações de caras (coroas)

$$\frac{N!}{l!\,(N-l)!} \leftarrow N \text{ obj. indistinguíveis}$$

permutações das caras / coroas

$$\to \text{Prob: } \frac{N!}{(N-l)!\,l!}\, p^l q^{N-l}$$

Ex. 2.1 - Ensaios de Bernoulli (cont.)

Usando a função característica.

$$l = \xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_N = \sum_{i=1}^{N} \xi_i$$

$$\xi_i = \begin{cases} 1, & \text{se cara} \\ 0, & \text{se coroa} \end{cases}$$

Com a notação da delta de Dirac

$$\rho_j(x) = p\,\delta(x-1) + q\,\delta(x)$$

A função característica de ξ_j é

$$g_j(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_j(x)\, e^{ikx}\, dx$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} [p\,\delta(x-1) + q\,\delta(x)]\, e^{ikx}\, dx$$

$$g_j(k) = p\, e^{ik(1)} + q\, e^{ik(0)}$$

$$\boxed{g_j(k) := p e^{ik} + q \equiv g(k)}$$

· A função característica da variável l é

$$G_l(k) = g_1(k)\, g_2(k) \dots g_N(k) = [g(k)]^N$$

$$= [p e^{ik} + q]^N$$

Binomial

$$= \sum_{l=0}^{N} \binom{N}{l} (p e^{ik})^l q^{N-l}$$

$$\boxed{G_l(k) = \sum_{l=0}^{N} \binom{N}{l} p^l q^{N-l} e^{ikl}} \quad (*)$$

Ex. 2.1 - Ensaios de Bernoulli (cont.)

Por outro lado

$$G_\ell(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_\ell(x)\, e^{ikx}\, dx \qquad \Rightarrow \boxed{P_N(\ell) = \binom{N}{\ell} p^\ell q^{N-\ell}}$$

onde

$$\rho_\ell(x) = P_N(0)\,\delta(x) + P_N(1)\,\delta(x-1) + \dots + P_N(N)\,\delta(x-N)$$

$$G_\ell(k) = P_N(0) + P_N(1)\, e^{ik} + P_N(2)\, e^{2ik} + \dots + P_N(N)\, e^{Nik}$$

$$\boxed{G_\ell(k) = \sum_{\ell=0}^{N} P_N(\ell)\, e^{ik\ell}}$$

$(*)$

$$\sum_{\ell=0}^{N} P_N(\ell)\, e^{ik\ell} = \sum_{\ell=0}^{N} \binom{N}{\ell} p^\ell q^{N-\ell}\, e^{ik\ell}$$

Lei dos grandes números

Teorema (Lei dos grandes números)

Dada uma sequência de N variáveis aleatórias $\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N$ **independentes** *e* **identicamente distribuídas**, *teremos*

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \xi_j = a$$

onde

$$a = \langle \xi_j \rangle$$

é a média da distribuição em comum para todas as variáveis.

- Este teorema é válido, é claro, apenas quando a média existe!

$$\int x\rho(x)dx \quad \text{e} \quad \int |x|\rho(x)dx \quad \text{são finitas.}$$

- Permite a interpretação frequencial de probabilidade.

Lei dos grandes números

Seja $y = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} \xi_j$

$$G_y(k) = \langle e^{iky} \rangle = \langle e^{ik\sum \xi_j/N} \rangle .$$

$$= \prod_{j=1}^{N} \langle e^{ik\xi_j/N} \rangle$$

A função característica de ξ_j é

$$g_j(k) = \langle e^{ik\xi_j} \rangle$$

$$G_y(k) = \prod_{j=1}^{N} \left[g_j\left(\frac{k}{N}\right) \right]$$

→ Identicamente distribuídas

$\Rightarrow g_j(k) \equiv g(k)$

$$\boxed{G_y(k) = \left[g\left(\frac{k}{N}\right) \right]^N} \quad (*)$$

$$g(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x)\, e^{ikx}\, dx.$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} x^n \, dx$$

$$= \sum \frac{(ik)^n}{n!} \int \rho(x)\, x^n \, dx \; ; \quad x \equiv \xi_j$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} \langle x^n \rangle = 1 + ik\langle x \rangle + \mathcal{O}(x)$$

$\Rightarrow \mathcal{O}(x)$ significa que

$$\frac{\mathcal{O}(x)}{x} \xrightarrow{x \to 0} 0$$

Lei dos grandes números

$\langle x \rangle = \langle \xi \rangle = a$

$g(k) = 1 + ika + \mathcal{O}(\xi)$

$$(*)\quad G_y(k) = \left[g\left(\frac{k}{N}\right) \right]^N$$

$$= \left[1 + \frac{ika}{N} + \mathcal{O}\left(\frac{k}{N}\right) \right]^N$$

$$\rightarrow \left[1 + \frac{ika}{N} \right]^N \qquad \left[1 + \frac{1}{N}\right]^N \xrightarrow[N\to\infty]{} e$$

$$\xrightarrow{N\to\infty} e^{ika}$$

$$\hookrightarrow \boxed{G_y(k) = e^{ika}}$$

Calculamos $\rho(y)$ fazendo a transformada de Fourier inversa de $G_y(k)$:

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

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iky} e^{ika}\, dk$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik(y-a)}\, dk$$

$$\boxed{\rho(y) = \delta(y-a)}$$

→ No limite $N \to \infty$, há apenas um valor possível para $y = \frac{1}{N}\sum_j \xi_j$ e é $\underline{\langle \xi \rangle = a}$.

Teorema central do limite

Teorema (Central do limite)

Dada uma sequência de N variáveis aleatórias $\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N$ **independentes**, **identicamente distribuídas**, *com média a e variância b, a variável aleatória*

$$z = \frac{1}{\sqrt{Nb}} \left[\sum_{j=1}^{N} \xi_j - Na \right]$$

terá distribuição gaussiana,

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-z^2/2},$$

no limite $N \to \infty$.

Teorema central do limite

Para cada ξ_j, tenho

$$g_j(k) \equiv g(k) = \exp\left\{ \sum_{i=1}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} K_n \right\}$$

identicamente distribuídas

expansão em cumulantes

$$g(k) = \exp\left\{ ik K_1 - \frac{k^2}{2} K_2 + \mathcal{O}(k^2) \right\}$$

dado no teorema

$$\boxed{g(k) = \exp\left\{ ika - \frac{k^2}{2} b + \mathcal{O}(k^2) \right\}} \quad (*)$$

Para a variável z:

$$G_z(k) = \langle e^{ikz} \rangle =$$

$$= \left\langle \exp\left\{ \frac{ik}{\sqrt{Nb}} \sum_{j=1}^{N} (\xi_j - a) \right\} \right\rangle$$

$$= \prod_{j=1}^{N} \left\langle \exp\left[\frac{ik}{\sqrt{Nb}} (\xi_j - a) \right] \right\rangle$$

$$= \prod_{j=1}^{N} \left\langle \exp\left(\frac{ik}{\sqrt{Nb}} \xi_j \right) \right\rangle \exp\left(-\frac{ika}{\sqrt{Nb}} \right)$$

$$= \prod_{j=1}^{N} g_j\left(\frac{k}{\sqrt{Nb}} \right) \exp\left(\frac{-ika}{\sqrt{Nb}} \right)$$

$g_j \equiv g$

$$= \left[g\left(\frac{k}{\sqrt{Nb}} \right) \exp\left(\frac{-ika}{\sqrt{Nb}} \right) \right]^N$$

$(*)$

$$= \left[\exp\left\{ \cancel{\frac{ika}{\sqrt{Nb}}} - \frac{b}{2} \left(\frac{k}{\sqrt{Nb}} \right)^2 + \mathcal{O}\left(\frac{k^2}{Nb} \right) \right\} \exp\left(\cancel{\frac{-ika}{\sqrt{Nb}}} \right) \right]^N$$

Teorema central do limite

$$G_z(k) = \left[\exp\left\{-\frac{\cancel{b}k^2}{2N\cancel{b}} + \mathcal{O}\left(\frac{k^2}{Nb}\right)\right\}\right]^N$$

$$= \exp\left[-\frac{k^2}{2} + N\,\mathcal{O}\left(\frac{k^2}{Nb}\right)\right]$$

Lembrando

$$\frac{\mathcal{O}\left(\frac{k^2}{Nb}\right)}{\frac{k^2}{Nb}} \xrightarrow{\frac{k^2}{Nb}\to 0} 0$$

$$\frac{Nb}{k^2}\,\mathcal{O}\left(\frac{k^2}{Nb}\right) \xrightarrow{N\to\infty} 0$$

$$\boxed{G_z(k) \xrightarrow{N\to\infty} \exp\left(-k^2/2\right)}$$

Para encontrar a densidade de probabilidade de z, calculo a transformada de Fourier inversa:

$$\rho_z(k) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikz}\, G_z(k)\, dk$$

$$= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikz}\, e^{-k^2/2}\, dk$$

(completar quadrados e usar integral da gaussiana da aula 2)

$$\boxed{\rho_z(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{-z^2/2}}$$

Lista de exercícios

- cap 2: 1, 2

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/