Notas Processos estocásticos

Nestor Caticha

7 de junho de 2011

A equação de Chapman Kolmogorov

Notas preliminares. Notas baseadas no livro de Gardiner[1].

[1] O que segue é inspirado entre outros em C.W. Gardiner, Handbook of Stochastic Methods

Processo de Markov a tempo contínuo

Seja um processo estocástico, $X(t)$ que representa um conjunto de variáveis aleatórias, indexadas por $t \in \mathbb{R}$, o "tempo", que tomam valores $x \in S$. Para uma sequência $t_0 < t_1.... < t_n$ a probabilidade do evento $\hat{X}_{0,n} = \{X(t_n) = x(t_n), X(t_{n-1}) = x(t_{n-1}, ...X(t_0) = x(t_0)\}$ é $\mathbb{P}(\hat{X}_{0,n})$. Pela regra do produto podemos separar esse conjunto em duas partes, o último valor e o resto:

$$\mathbb{P}(\hat{X}_{0,n}) = \mathbb{P}(x_n|\hat{X}_{0,n-1})\mathbb{P}(\hat{X}_{0,n-1}) \tag{1}$$

Por conveniência usaremos uma notação compacta $\mathbb{P}(X_i = x_i) = \mathbb{P}(x_i)$.

Para o caso Markoviano em que a única informação relevante é o último valor de x conhecido, obtemos

$$\mathbb{P}(\hat{X}_{0,n}) = \mathbb{P}(x_n|x_{n-1})\mathbb{P}(\hat{X}_{0,n-1})$$

que pode ser estendido a

$$\mathbb{P}(\hat{X}_{0,n}) = \prod_{i=1,n} \mathbb{P}(x_i|x_{i-1})\mathbb{P}(x_0)$$

Queremos descrever a evolução de um sistema físico modelado por um processo X e consideramos dois instantes de tempo inicial t_1 e t_3 final. A dinâmica entre dois instantes quaisquer pode ser muito complicada, mas temos experiência que talvez seja possível avançar na descrição se intervalos menores forem considerados. Podemos considerar um valor qualquer fixo t_2, intermediário ($t_3 > t_2 > t_1$) e considerar que o valor intermediário X_3 pode ser qualquer um em S. Para um valor específico intermediário x_3 a probabilidade $\mathbb{P}(x_3x_2x_1)$ é a probabilidadede de uma trajetória $x_1 \rightarrow x_2 \rightarrow x_3$. Marginalizando sobre X_3

$$\mathbb{P}(x_3x_1) = \int_S dx_2\mathbb{P}(x_3x_2x_1)$$

usando a equação 1 obtemos, para processos de Markov

$$\mathbb{P}(x_3x_1) = \int_S dx_2\mathbb{P}(x_3|x_2)\mathbb{P}(x_2|x_1)\mathbb{P}(x_1) \tag{2}$$

Dividindo por $\mathbb{P}(x_1)$, obtemos a equação de Chapman-Kolmogorov:

$$\mathbb{P}(x_3|x_1) = \int_S dx_2\mathbb{P}(x_3|x_2)\mathbb{P}(x_2|x_1) \tag{3}$$

Em palavras: a probabilidade de, estando em t_1 em x_1 ir a x_3 em t_3 é dada pela **soma** sobre todos os valores intermediários x_2 da probabilidade de ir de x_1 a x_2 e de x_2 até x_3. Esta última é dada pelo **produto** da probabilidade de ir de x_1 em t_1 a x_2 em t_2 pela probabilidade de ir de x_2 a x_3 em t_3.

Note que mencionamos explicitamente a regra do produto e da soma das probabilidades. Voltaremos depois a tratar como exemplo a Mecânica Quântica não relativística, onde também aparecem regras de produto e soma e o equivalente à equação de Chapman-Kolmogorov na formulação integrais de trajetórias de Feynmann.

A equação integral de CK pode ser transformada em uma equação diferencial parcial. Esta tem em MQ um análogo, a equação de Schrödinger, obtida quando os números reais associados 'a plausibilidade da primeira aula forem substituidos por numeros complexos.

Equação de Chapman-Kolmogorov diferencial

Consideramos agora o caso em que $x \in S$ são os reais. A generalização para mais dimensões fica como exercício. Usaremos uma classe de funções auxiliares que funcionam como andáimes e depois serão retirados. Uma função $f(x)$ duas vezes diferenciável, que vai para zero para $x \to \pm\infty$.

Estamos interessados em descrever probabilidades do tipo $\mathbb{P}(x(t+\Delta t)|z(t))$ e seus momentos quando $\Delta t \to 0$, x e z são reais . Procedemos por analogia 'a mecânica. O que é um potencial? Quando é necessário introduzir um? Quando há forças agindo sobre uma partícula? Se esperamos por algum motivo que a trajetória seja uma linha reta (e.g por simetria) mas a experiência mostra que não é assim, então introduzimos. uma força. Isto será interessante se há muitos casos em que a mesma técnica se mostra útil. Não há sentido em introduzir um truque novo a cada novo caso. Se assim fosse não haveria nenhuma vantagem. Vamos supor que existem funções $A(z,t)$, $B(z,t)$ e $W(x|zt)$ que dependem da posição e talvez do tempo, que aparecem em várias situações e que sua utilidade não se restringe a um caso particular. Vamos supor que estas funções são suficientes para determinar a evolução da probabilidade. Elas são definidas para $\epsilon > 0$,

$$W(x|z,t) = \frac{1}{\Delta t}\mathbb{P}(x(t+\Delta t)|z(t)) \tag{4}$$

$$A(z,t) = \lim_{\epsilon\to 0}\lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}\int_{|x-z|<\epsilon}(x-z)\mathbb{P}(x(t+\Delta t)|z(t))dx \tag{5}$$

$$B(z,t) = \lim_{\epsilon\to 0}\lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}\int_{|x-z|<\epsilon}(x-z)^2\mathbb{P}(x(t+\Delta t)|z(t))dx \tag{6}$$

A interpretação destes termos é a seguinte. O termos $W(x|zt)$ descrevem pulos instantâneos de z a x. Não esperamos encontrar em física clássica objetos que pulem de forma instantânea de uma posição a outra, mas pode ser que em alguns casos este tipo de objeto matemático seja útil dentro de alguma aproximação. Se houver variáveis discretas, então queremos manter este tipo de objeto para descrever taxas de transição entre um estado e outro.

A função $A(z,t)$ está relacionada ao valor esperado da velocidade de uma partícula. Em casos que A for não nulo teremos a possibilidade de descrever a deriva de uma partícula. Um exemplo é o movimento de moléculas de DNA ou de proteínas em um gel sob a ação de um campo elétrico [2].

[2] Exemplos **??**

Temos a impressão que é necessário saber a probabilidade para poder calculá-las, mas será mais comum supor alguma forma para as três e usar os resultados a seguir para calcular a probabilidade.

Procuramos uma equação diferencial, é natural considerar condições iniciais $y(t')$. O valor esperado de uma função teste $f(x)$ é dado por

$$\bar{f}_{t|y} = \mathbb{E}[f(x)|t, yt'] = \int f(x)\mathbb{P}(x(t)|y(t'))dx, \tag{7}$$

para estudar sua evolução tomamos a derivada temporal:

$$\partial_t \bar{f}_{t|y} = \lim_{\Delta t\to 0} \frac{1}{\Delta t}\int f(x)\{\mathbb{P}(x(t+\Delta t)|y(t')) - \mathbb{P}(x(t)|y(t'))\}dx. \tag{8}$$

Usando a equação de CK, introduzimos um ponto intermediário (z,t)

$$\partial_t \bar{f}_{t|y} = \lim_{\Delta t\to 0} \frac{1}{\Delta t}\{\int dx \int dz f(x)\mathbb{P}(x(t+\Delta t)|z(t))\mathbb{P}(z(t)|y(t'))dx - \int f(z)\mathbb{P}(z(t)|y(t'))dz\}. \tag{9}$$

No último termo mudamos a notação da variável de integração de x para z.

Vamos separar os casos em que $|x-z| \geq \epsilon$ e $|x-z| < \epsilon$, que será levado a zero posteriormente. A separação significa $\int dxdzQ = \int_{|x-z|<\epsilon} dxdzQ + \int_{|x-z|\geq\epsilon} dxdzQ$. Usaremos a expansão de Taylor de $f(x)$, para $|x-z| < \epsilon$

$$f(x) = f(z) + f'(z)(x-z) + \frac{1}{2}(x-z)^2 f''(z) + \mathcal{O}(\epsilon^3).$$

$$\begin{aligned}
\partial_t \bar{f}_{t|y} \quad = \quad & \lim_{\epsilon\to 0}\lim_{\Delta t\to 0} \frac{1}{\Delta t}\{\int_{|x-z|<\epsilon} dxdz(f(z) + f'(z)(x-z) + \frac{1}{2}(x-z)^2 f''(z) + \mathcal{O}(\epsilon^3)) \\
\times \quad & \mathbb{P}(x(t+\Delta t)|z(t))\mathbb{P}(z(t)|y(t')) + \\
& \int_{|x-z|\geq\epsilon} dxdz f(x)\mathbb{P}(x(t+\Delta t)|z(t))\mathbb{P}(z(t)|y(t'))dx - \\
& \int f(z)\mathbb{P}(z(t)|y(t'))dz\}.
\end{aligned} \tag{10}$$

Podemos reescrever o termo da primeira linha que contém $f(z)$ na penúltima linha

$$\begin{aligned}
\partial_t \bar{f}_{t|y} &= \lim_{\epsilon\to 0}\lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}\{\int_{|x-z|<\epsilon} dxdz(f'(z)(x-z)+\frac{1}{2}(x-z)^2 f''(z)+\mathcal{O}(\epsilon^3)) \\
\times & \mathbb{P}(x(t+\Delta t)|z(t))\mathbb{P}(z(t)|y(t'))+ \\
& \int_{|x-z|\geq\epsilon} dxdzf(x)\mathbb{P}(x(t+\Delta t)|z(t))\mathbb{P}(z(t)|y(t'))+ \\
& \int_{|x-z|<\epsilon} dxdzf(z)\mathbb{P}(x(t+\Delta t)|z(t))\mathbb{P}(z(t)|y(t'))- \\
& \int f(z)\mathbb{P}(z(t)|y(t'))dz\}. \qquad (11)
\end{aligned}$$

Para fazer a integral em x na primeira linha usamos as definições de A e B

$$\begin{aligned}
\partial_t \bar{f}_{t|y} &= \int dz(f'(z)A+\frac{1}{2}Bf''(z)+\mathcal{O}(\epsilon))\mathbb{P}(z(t)|y(t'))+ \\
& \lim_{\epsilon\to 0}\lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}\{\int_{|x-z|\geq\epsilon} dxdzf(x)\mathbb{P}(x(t+\Delta t)|z(t))\mathbb{P}(z(t)|y(t'))+ \\
& \int_{|x-z|<\epsilon} dxdzf(z)\mathbb{P}(x(t+\Delta t)|z(t))\mathbb{P}(z(t)|y(t'))- \\
& \int f(z)\mathbb{P}(z(t)|y(t'))dz\}. \qquad (12)
\end{aligned}$$

Note que nas integrais acima feitas nas regiões maior e menor que ϵ o integrando não é o mesmo, numa aprece $f(x)$ e na outra $f(z)$. Vamos separar o último termo também em regiões maior e menor que ϵ, de forma que as integrais sobre a região $|x-z|<\epsilon$ se cancelam, sobrando uma diferença entre integrais na região $|x-z|\geq\epsilon$. Numa delas fazemos a mudança de nome de variáveis $x\leftrightarrow z$ e usamos a definição para os W, equação 4

$$\begin{aligned}
\partial_t \bar{f}_{t|y} &= \int dz(f'(z)A+\frac{1}{2}Bf''(z))\mathbb{P}(z(t)|y(t'))+ \\
& \int dzf(z)\{\int dxW(x|zt)\mathbb{P}(x|y(t'))-\int dxW(z|xt)\mathbb{P}(z|y(t'))\} \\
& \qquad (13)
\end{aligned}$$

Integrando por partes, uma e duas vezes, respectivamente os termos com A e B. Os termos de superfície não contribuem devido às restrições em f. Podemos rearranjar de forma a que fique a integral de $f(z)$ vezes o termo entre colchetes igual a zero, para qualquer função f arbitrária

$$\begin{aligned}
0 &= \int dzf(z)\{-\frac{\partial\mathbb{P}(z(t)|y(t')}{\partial t}-\frac{\partial(A(z,t)\mathbb{P}(z(t)|y(t'))}{\partial z}+\frac{1}{2}\frac{\partial^2(B(z,t)\mathbb{P}(z(t)|y(t'))}{\partial z^2}+ \\
& \int dx(W(x|zt)\mathbb{P}(x|y(t'))-W(z|xt)\mathbb{P}(z|y(t')))\} \\
& \qquad (14)
\end{aligned}$$

Portanto o integrando deve ser nulo. Obtemos assim a EDP de Chapman-Kolmogorov:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathbb{P}(z|y(t'))}{\partial t} &= -\frac{\partial(A(z,t)\mathbb{P}(z|y(t'))}{\partial z} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2(B(z,t)\mathbb{P}(z|y(t'))}{\partial z^2} + \\ &\int dx(W(x|zt)\mathbb{P}(x|y(t')) - W(z|xt)\mathbb{P}(z|y(t')))\}.\end{aligned} \tag{15}$$

A equação de Fokker-Planck

Olharemos primeiro o caso de $W(x|zt) = 0$, o caso em que não há pulos e as trajetórias sâo contínuas. Obtemos a equação de Fokker-Planck

$$\frac{\partial \mathbb{P}(z|y(t'))}{\partial t} = -\frac{\partial(A(z,t)\mathbb{P}(z|y(t'))}{\partial z} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2(B(z,t)\mathbb{P}(z|y(t'))}{\partial z^2} \tag{16}$$

Estudaremos dois casos particulares mas importantes, os processos de Wiener e de Ornstein e Uhlembeck.

Processo de Wiener

Este é provavelmente o processo mais importante, se julgado pela utilidade que encontra nas aplicações nas mais diversas áreas e pela sua utilidade na construção de outros processos.

Tomamos $A = 0$ e $B = 2D =$ constante, na equação de Fokker-Planck, obtemos a equação

$$\frac{\partial \mathbb{P}(z|y(t'))}{\partial t} = D\frac{\partial^2 \mathbb{P}(z|y(t'))}{\partial z^2} \tag{17}$$

Esta equação foi originalmente estudada por Fourier[3]. É chamada equação do calor ou da difusão. Para completar a informação necessária para obter $P(z(t)|y(t'))$ precismos dar condições iniciais. Escolhemos o caso mais importante, $P(z(t')|y(t')) = \delta(z-y)$, que leva à função de Green. A importância decorre de que para qualquer outra condição inicial, a solução pode ser obtida usando a função de Green.

[3] Veja Fourier, Vol 45 Great Books of the Western World, para uma exposição de um dos trabalhos mais influentes na história da Física Matemática

O método de solução é o de Fourier. A função característica e $\mathbb{P}$ são um par de Fourier:

$$\Phi(k,t) = \int dz \mathbb{P}(z|y(t'))e^{ikz} \tag{18}$$

$$\mathbb{P}(z|y(t'))) = \int \frac{dk}{2\pi}\Phi(k,t)e^{-ikz}. \tag{19}$$

As derivadas espaciais viram potências no espaço k

$$\frac{\partial^2 \mathbb{P}(z|y(t'))}{\partial z^2} = -\int \frac{dk}{2\pi}k^2\Phi(k,t)e^{-ikz} \tag{20}$$

e a equação satisfeita por Φ é ordinária

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = -Dk^2\Phi \tag{21}$$

sujeita a

$$\Phi(k,t') = \int dz\delta(z-y)e^{ikz} = e^{iky},$$

assim

$$\Phi(k,t) = e^{-Dk^2(t-t')}\Phi(k,t') \tag{22}$$

portanto

$$\Phi(k,t) = e^{-Dk^2(t-t')}e^{iky} \tag{23}$$

que é uma gaussiana. Fazendo a transformada inversa

$$\mathbb{P}(z(t)|y(t')) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D(t-t')}}e^{-\frac{(z-y)^2}{4D(t-t')}} \tag{24}$$

que é para todos os valores de $t > t'$ uma gaussiana[4] com variância que cresce linearmente com o tempo:

[4] Faça o gráfico de $\mathbb{P}(z(t)|y(t'))$ para diferentes valores de $t-t'$.

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(Z(t)|Y(t')) &= \int dz\, z\mathbb{P}(z|y(t')) = y(t') && (25)\\ \mathbb{E}((Z(t)-Y(t'))^2|Y(t')) &= \int dz\, z^2\mathbb{P}(z|y(t')) - y(t')^2 && (26)\\ &= 2D(t-t') && (27) \end{aligned}$$

Calculamos a função de Green $G(z-y, t-t') = \mathbb{P}(z(t)|y(t'))$. A solução geral (qdo $-\infty < x < \infty$) da equação de difusão $\partial_t F(x,t) = D\partial^2 F(x,t)$ com $F(x,0) = f(x)$, é dada por $F(x,t) = \int G(x-y,t)f(y)dy$

Trajetórias

Suponha que usamos o processo de Wiener para descrever a trajetória de uma partícula. Este é o famos movimento Browniano, estudado por Einstein e Smoluchowski.

Se a posição é assim descrita, o que se pode dizer da velocidade? Uma estimativa poderia ser feita olhando para $v_{\Delta t} = (z(t+\Delta t) - z(t))/\Delta t$ e tomando o limite de $\Delta t \to 0$. Mas como z é uma variável aleatória é natural calcular a probabilidade de que $v_{\Delta t}$ tome valores em algum intervalo, por exemplo que seja maior em módulo que uma constante a qualquer, $\mathbb{P}(|v_{\Delta t}| > a)$ que é dada

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(|v_{\Delta t}| > a) &= \int_{|x(t+\Delta t)-x(t)|>a\Delta t} \mathbb{P}(x(t+\Delta t)|x(t)) && (28)\\ &= 2\int_{a\Delta t}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2D\Delta t}}\frac{dx}{\sqrt{2\pi D\Delta t}} && (29)\\ &= \text{erfc}(a\sqrt{\frac{\Delta t}{2D}}) \stackrel{\Delta t\to 0}{\to} 1 && (30) \end{aligned}$$

independentemente de a, que pode ser tomada tão grande quanto se queira, mostrando que as trajetórias neste modelo não são diferenciáveis.

Independência dos incrementos

Para uma sequência ordenada de instantes $t_0 < t_1 < t_2.... < t_n$, definindo $\Delta x_k = x_k - x_{k-1}$ e $\Delta t_k = t_k - t_{k-1}$, teremos

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}(x_n x_{n-1}....x_1|x_0) &= \mathbb{P}(x_n|x_{n-1})\mathbb{P}(x_{n-1}|x_{n-2})...\mathbb{P}(x_1|x_0) && (31)\\
&= \prod_{k=1}^{n} \mathbb{P}(x_k|x_{k-1}) && (32)\\
&= \prod_{k=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{4\pi D\Delta t_k}} e^{-\frac{(\Delta x_k)^2}{4D(\Delta t_k)}} && (33)
\end{aligned}$$

que podemos interpretar

$$\mathbb{P}(\Delta x_n \Delta x_{n-1}....\Delta x_1) = \prod_{k=1}^{n} \mathbb{P}(\Delta x_k) \quad (34)$$

mostrando a independência dos incrementos. Também mostramos que os incrementos tem média nula, que será usado a seguir para calcular a função de auto-correlação.

Autocorrelação temporal no Processo de Wiener

Suponha que $t' < t_1 < t_2$, entao

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}(X_2X_1|X(t')) &= \mathbb{E}(X_2X_1|X(t')) - \mathbb{E}(X_1X_1|X(t')) + \mathbb{E}(X_1X_1|X(t'))\\
&= \mathbb{E}((X_2 - X_1)X_1|X(t')) + \mathbb{E}(X_1X_1|X(t'))\\
&= \mathbb{E}((X_2 - X_1)(X_1 - X')) + \mathbb{E}(X_1^2|X(t'))\\
&= 0 + 2D(t_1 - t') + X(t')^2 && (35)
\end{aligned}$$

onde usamos no primeiro termo da última linha a independência e no segundo a variância , dada pela equação 27. A autocorrelaçao é definida

$$\begin{aligned}
< (X_2X_1|X(t') > &= \mathbb{E}(X_2X_1|X(t')) - \mathbb{E}(X_2|Y(t')\mathbb{E}(X_1|X(t') && (36)\\
&= \mathbb{E}((X_2 - X')(X_1 - X')) && (37)
\end{aligned}$$

e

$$< (X_2X_1|X(t') > = 2D(t_1 - t') \quad (38)$$

O leitor pode se perguntar porque usamos $\mathbb{E}((X_2 - X_1)(X_1 - X')) = 0$ mas a autocorrelação $\mathbb{E}((X_2 - X')(X_1 - X')) \neq 0$. No primeiro caso os incrementos são independentes de média nula. No segundo o intervalo maior inclui dentro dele o intervalo menor, portanto não são independentes e seu produto tem esperança não nula.

Processo de Ornstein e Uhlembeck

O processo de difusão simples estudado na secção anterior não é a única tentativa de modelagem do problema de movimento Browniano. O processo de OU tem sido muito importante na teoria de processos estocásticso O processo de OU é definido pela escolha [5]

[5] Uhlembeck, G. E. e Ornstein, L. S. On the theory of Brownian motion , Physical Review Vol **36**, No 3

$$W = 0, \quad A = -\theta x \quad B = D$$

$$\frac{\partial \mathbb{P}(x|y(t'))}{\partial t} = \theta \frac{\partial x \mathbb{P}(x|y(t'))}{\partial x} + \frac{1}{2} D \frac{\partial^2 \mathbb{P}(z|y(t'))}{\partial z^2} \tag{39}$$

Novamente usamos a função característica $\Phi(k,t)$ (equação 18). A equção de FP no espaço de Fourier é

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = -\theta k \frac{\partial \Phi}{\partial k} - Dk^2 \Phi \tag{40}$$

uma equação diferencial parcial, que consideraremos sujeita a

$$\Phi(k,t') = \int dx \delta(x-y) e^{ikx} = e^{iky},$$

O avanço ao passar para o espaço de Fourier é que a equação parcial é de primeira ordem que pode ser resolvida usando o método das *características*[6]. Note que usamos a palavra *característica* de uma forma diferente que não tem relação com a função característica Φ.

[6] V. Arnold, EDO, ed Mir

Queremos resolver o problema de Cauchy para a equação 40, obter $\Phi(k,t)$ dada a condição inicial $\Phi(k,0)$.

Chame $r = (r_1 .... r_N)$. Uma equação linear

$$\sum_{n=1}^{N} a_n(r', u(r')) \frac{\partial u}{\partial r'_n} = 0 \tag{41}$$

para $N = 2$ as equações diferenciais das *características*

$$\frac{dr_1}{a_1} = \frac{dr_2}{a_2} \tag{42}$$

portanto

$$\frac{dr_2}{dr_1} = \frac{a_2}{a_1} \tag{43}$$

Suponha que integremos essa equaçao

$$r_2 = f_c(r_1) \tag{44}$$

onde mostramos explicitamente a dependência em uma constante C. Note que a combinação $r_2/f(r_1)$ é uma constante. Tentemos como solução da EDP 41 uma função restrita a ser diferenciável e depender de r_1 e r_2 somente através da combinação $z = r_2/f_c(r_1)$, $u = F(r_2/f_c(r_1))$

$$0 \stackrel{?}{=} \frac{dF}{dz}\{a_1\frac{\partial z}{\partial r_1}+a_2\frac{\partial z}{\partial r_2}\} \tag{45}$$

$$= \frac{dF}{dz}\{-a_1\frac{r_2 df_c/dr_1}{f_c^2}+a_2\frac{1}{f_c}\} \tag{46}$$

$$= -\frac{dF}{dz}\frac{a_2}{f_c}\{\frac{r_2}{f_c}-1\} \tag{47}$$

que vemos ser zero usando as equações 43 e 44

Uma equação diferencial quase-linear

$$\sum_{n=1}^{N} a_n(r',u(r'))\frac{\partial u}{\partial r'_n} = b(r',u(r')) \tag{48}$$

As *características* obedecem à (forma simétrica)

$$\frac{dr_1}{a_1} = \frac{dr_2}{a_2} = ... = \frac{du}{b} \tag{49}$$

BLBLBLBLBLBLBLBLBLBLABLABLA

Note que se a equação quase-linear for escrita

$$\sum_{n=1}^{N+1} a_n(r)\frac{\partial u}{\partial r_n} = 0 \tag{50}$$

onde $r = (r', u)$, isto é $r_i = r'_i$ para $i = 1...N$ e $r_{N+1} = u$ e $a_{N+1}(r) = b(r', u)$ vemos que podemos escrever as equações das características como

$$\frac{dr_1}{a_1} = \frac{dr_2}{a_2} = ... = -\frac{du}{b} \tag{51}$$

Para a FK do OU no espaço de Fourier, as equações das *características*

$$\frac{dt}{1} = \frac{dk}{\theta k} = \frac{d\Phi}{Dk^2\Phi} \tag{52}$$

que resultam nas EDO

$$\Phi^{-1}d\Phi = -\frac{Dk^2}{\theta k} \tag{53}$$

$$\ln\Phi = -\frac{Dk^2}{4\theta}+c \tag{54}$$

$$\Phi = Ce^{-\frac{Dk^2}{4\theta}} \tag{55}$$

É claro que C deve ser uma constante mas também deve incluir a dependência no tempo t. Só pode ser as duas coisas ao mesmo tempo se for uma função de uma combinação constante de t e k. Para isso olhamos para a outra *característica*

$$\theta dt = \frac{dk}{k} \tag{56}$$

$$k = C'e^{\theta t} \tag{57}$$

$$C' = ke^{-\theta t} \tag{58}$$

A solução geral

$$\Phi(k,t) \quad = \quad C(ke^{-\theta t})e^{-\frac{Dk^2}{4\theta}} \tag{59}$$

onde $C(ke^{-\theta t})$ é uma função ainda desconhecida g que depende de de k e t somente através da combinação $ke^{-\theta t}$. Para avançar precisamos uma condição inicial: $\mathbb{P}(x(0)|x_0(0)) = \delta(x - x_0)$. Portanto a transformada de Fourier será $\Phi(k,0) = \exp(ikx_0)$.

$$\begin{aligned}
\Phi(k,t) &= C(ke^{-\theta t})e^{-\frac{Dk^2}{4\theta}} \\
\Phi(k,0) &= e^{ikx_0} = g(k,0)e^{-\frac{Dk^2}{4\theta}} \\
g(k,0) &= e^{ikx_0}e^{\frac{Dk^2}{4\theta}} \\
g(k,t) &= e^{ike^{-\theta t}x_0}e^{\frac{Dk^2e^{-2\theta t}}{4\theta}} \\
\Phi(k,t) &= e^{ike^{-\theta t}x_0}e^{\frac{Dk^2e^{-2\theta t}}{4\theta}}e^{-\frac{Dk^2}{4\theta}} \\
\Phi(k,t) &= e^{-\frac{Dk^2}{4\theta}(1-e^{-2\theta t})}e^{ikx_0e^{-\theta t}} \qquad (60)
\end{aligned}$$

A expressão acima é bem simples, pois é uma gaussiana

$$\Phi(k,t) \quad = \quad \exp(-\frac{k^2\sigma^2_{\text{OU}}}{2})e^{ik\mu_{\text{OU}}} \tag{61}$$

$$\text{com} \qquad \sigma^2_{\text{OU}}(t) = \frac{D}{2\theta}(1 - e^{-2\theta t}) \tag{62}$$

$$\text{e} \qquad \mu_{\text{OU}}(t) = x_0e^{-\theta t} \tag{63}$$

e a transformada inversa $\mathbb{P}(x,t|x_0,t'=0))$ é uma gaussiana com média μ_{OU} e variância σ_{OU}.

$$\mathbb{P}(x,t|x_0,t'=0)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2_{\text{OU}}}}e^{-\frac{(x-\mu_{\text{OU}})^2}{2\sigma^2_{\text{OU}}}} \tag{64}$$

Autocorrelação temporal no Processo de Ornstein e Uhlembeck

Para $t_2 > t_1 > 0$

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}(X_2X_1|X(0)=x_0) &= \mathbb{E}(X_2X_1|X(0)=x_0) - \mathbb{E}(X_1X_1|X(0)=x_0) + \mathbb{E}(X_1X_1|X(0)=x_0) \\
&= \mathbb{E}((X_2-X_1)X_1|X(t')) + \mathbb{E}(X_1X_1|X(t')) \\
&= \mathbb{E}((X_2-X_1)(X_1-X')) + \mathbb{E}(X_1^2|X(t')) \\
&= 0 + 2D(t_1-t') + X(t')^2 \qquad (65)
\end{aligned}$$

Função de Green para a Equação de Fokker-Planck em 1 dimensão, o efeito de condições de fronteira

O processo descrito pela equação diferencial estocástica

$$dx = A(x,t)dt + \sqrt{B(x,t)}dW(t) \tag{66}$$

satisfaz uma equação de Fokker Planck:

$$\partial_t p(x,t) = -\partial_x(A(x,t)p(x,t)) + \frac{1}{2}\partial_x^2(B(x,t)p(x,t)) \tag{67}$$

Nesta seção olharemos somente para o caso em que as funções de deriva e difusão são independentes do tempo: $A(x)$ e $B(x)$.

Defina a corrente

$$J = A(x)p(x,t) - \frac{1}{2}\partial_x(B(x)p(x,t))$$

A equação de FP é equivalente à equação de continuidade:

$$\partial_t p(x,t) + \partial_x J = 0 \tag{68}$$

Condições de Fronteira

Queremos resolver este problema no intervalo $a \leq x \leq b$ sujeita a diferentes situações descritas pelas condições de fronteira abaixo:

- Barreira Absorvente

onde

$$p(a,t) = p(b,t) = 0$$

- Barreira refletora

onde

$$J(a,t) = J(b,t) = 0$$

Se houver mais de uma dimensão espacial, estas condições serão substituidas por n.$J = 0$ nas bordas refletoras.

Estado estaciónario

Suponha que $J = 0$, portanto não há corrente. Segue que, no estado estacionárioa distribuição de probabilidade $p_s(x)$ satisfaz

$$0 = A(x)p_s(x)) - \frac{1}{2}\partial_x(B(x)p_s(x)) \tag{69}$$

e também que $\partial_t p_s(x) = 0$.

Esta equação é fácil de analisar, chame $\phi(x) = B(x)p_s(x)$, vemos que satisfaz

$$0 = \frac{A(x)}{B(x)}\phi - \frac{1}{2}\partial_x\phi,$$

portanto

$$\frac{1}{\phi}\partial_x\phi = 2\frac{A}{B} \tag{70}$$

e

$$\phi(x) = \phi(a)e^{2\int_a^x \frac{A(x')}{B(x')}dx'} \tag{71}$$

$$p_s(x) = p_s(a)\frac{B(a)}{B(x)}e^{2\int_a^x \frac{A(x')}{B(x')}dx'} \tag{72}$$

Equação adjunta de Fokker Planck

Usando a solução do estado estacionário p_s podemos introduzir a função $q(x,t)$

$$p(x,t) = p_s(x)q(x,t). \tag{73}$$

Substituindo na equação 67 de FP, temos

$$\begin{aligned} p_s(x)\partial_t q(x,t) &= -\partial_x(A(x)p_s(x)q(x,t)) + \frac{1}{2}\partial_x^2(B(x)p_s(x)q(x,t)) \\ &= -(A(x)p_s(x))'q(x,t) - (A(x)p_s(x))q'(x,t) \\ &+ \frac{1}{2}\left((B(x)p_s(x))''q(x,t) + 2(B(x)p_s(x))'q'(x,t) + B(x)p_s(x))q''(x,t)\right), \end{aligned} \tag{74}$$

onde as linhas denotam derivadas parciais com respeito a x. Usando que a corrente no estado estacionário é nula $0 = J_s = A(x)p_s(x) - \frac{1}{2}(B(x)p_s(x))'$

$$\begin{aligned} p_s(x)\partial_t q(x,t) &= -(A(x)p_s(x))'q(x,t) - (A(x)p_s(x))q'(x,t) \\ &+ \frac{1}{2}\left((B(x)p_s(x))''q(x,t) + 4A(x)p_s(x)q'(x,t) + B(x)p_s(x))q''(x,t)\right) \end{aligned}$$

Usando a equação 69 vemos que o primeiro termo da primeira linha e o primeiro da segunda linha se cancelam e podemos escrever

$$\partial_t q(x,t) = A(x)q'(x,t) + \frac{1}{2}B(x)q''(x,t) \tag{75}$$

que é a equação adjunta de Fokker Planck.

Olhando para atrás no tempo

Respondento a uma pergunta em classe. Faça um tratamento equivalente ao que levou da equação de Chapman-Kolmogorov integral à EDP, mas agora considere derivadas temporais na variável no passado. Ao olhar para o valor esperado de uma função teste $f(x)$ dado por

$$\bar{f}_{t|y} = \mathbb{E}[f(x)|t, yt'] = \int f(x)\mathbb{P}(x(t)|y(t'))dx, \tag{76}$$

olharemos as propriedades da derivada temporal com respeito a t'. O resultado é a equação de Chapman-Kolmogorov *backwards* (Aceito sugestões de nome em portugues). Na ausência de pulos ($W = 0$)

se torna uma equação de Fokker Planck para atrás no tempo que é análoga à equação adjunta

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathbb{P}(z|y(t'))}{\partial t'} &= A(y,t)\frac{\partial(\mathbb{P}(z|y(t'))}{\partial y} + \frac{1}{2}B(y,t)\frac{\partial^2 \mathbb{P}(z|y(t'))}{\partial y^2} + \\ & \int dx W(x|yt')(\mathbb{P}(x|y(t')) - \mathbb{P}(z|y(t')))\}.\end{aligned}$$

Solução da FP

Vamos tentar uma solução da equação de Fokker-Planck representada formalmente por uma soma

$$p(x,t) = \sum_\lambda C_\lambda(t) P_\lambda(x) \tag{77}$$

e ver que condições devem satisfazer as funções $C_\lambda(t)$ e $P_\lambda(x)$. Substituindo a solução 92 na equação de FP (67) vemos

$$\sum_\lambda \frac{dC_\lambda(t)}{dt} P_\lambda(x) = \sum_\lambda C_\lambda(t)\left(-\frac{d}{dx}(AP_\lambda) + \frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}(BP_\lambda)\right) \tag{78}$$

Se $P_\lambda(x)$ satisfizer a equação ordinária

$$-\lambda P_\lambda = -\frac{d}{dx}(AP_\lambda) + \frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}(BP_\lambda) \tag{79}$$

basta então que as funções $C_\lambda(t)$ satisfaçam

$$\frac{dC_\lambda(t)}{dt} = -\lambda C_\lambda(t) \tag{80}$$

e portanto $C_\lambda(t) = C_\lambda(0)e^{-\lambda t}$.

Ortogonalidade

Agora que sabemos que a dependência temporal é exponencial podemos estudar mais a fundo as propriedades da parte espacial, em particular suas propriedades de ortogonalidade. Tentemos soluções das equações 67 e 75 onde a dependência temporal é simplesmente exponencial

$$p(x,t) = P_\lambda(x)e^{-\lambda t} \tag{81}$$

$$q(x,t) = Q_\lambda(x)e^{-\lambda t} \tag{82}$$

e P_λ te Q_λ serão escolhidos de forma a satisfazer as condições de contorno. Substituindo nas equações 67 e 75, obtemos

$$-\lambda P_\lambda = -(AP_\lambda)' + \frac{1}{2}(BP_\lambda)'' \tag{83}$$

$$-\lambda Q_\lambda = AQ'_\lambda + \frac{1}{2}BQ''_\lambda \tag{84}$$

Considere as equações com valores de λ diferentes λ_1 e λ_2. Multiplicando a primeira por Q_{λ_2}, a segunda por P_{λ_1}, subtraindo os resultados e integrando no interval $a \leq x \leq b$, obtemos:

$$\begin{aligned}(\lambda_1 - \lambda_2)\int_a^b P_{\lambda_1} Q_{\lambda_2} dx &= \int_a^b \left((AP_{\lambda_1})' - \frac{1}{2}(BP_{\lambda_1})'' \right) Q_{\lambda_2} dx + \\ &+ \int_a^b \left(AQ'_{\lambda_2} + \frac{1}{2} BQ''_{\lambda_2} \right) P_{\lambda_1} dx \end{aligned} \tag{85}$$

$$\begin{aligned}(\lambda_1 - \lambda_2)\int_a^b P_{\lambda_1} Q_{\lambda_2} dx &= \int_a^b \Big((AP_{\lambda_1})' Q_{\lambda_2} + AP_{\lambda_1} Q'_{\lambda_2} + \\ &+ \frac{1}{2} BP_{\lambda_1} Q''_{\lambda_2} - \frac{1}{2}(BP_{\lambda_1})'' Q_{\lambda_2} \Big) dx \end{aligned}$$

$$= \int_a^b \left((AP_{\lambda_1} Q_{\lambda_2})' + \frac{1}{2} BP_{\lambda_1} Q''_{\lambda_2} - \frac{1}{2}(BP_{\lambda_1})'' Q_{\lambda_2} \right) dx.$$

Somando e subtraindo $(BP_{\lambda_1})' Q'_{\lambda_2}$ dentro do integrando

$$(\lambda_1 - \lambda_2)\int_a^b P_{\lambda_1} Q_{\lambda_2} dx = (AP_{\lambda_1} Q_{\lambda_2})|_a^b + \frac{1}{2}\int_a^b \left(BP_{\lambda_1} Q''_{\lambda_2} + (BP_{\lambda_1})' Q'_{\lambda_2} - (BP_{\lambda_1})' Q'_{\lambda_2} - (BP_{\lambda_1})'' Q_{\lambda_2} \right) dx$$

$$= (AP_{\lambda_1} Q_{\lambda_2})|_a^b + \frac{1}{2}\int_a^b \left((BP_{\lambda_1}) Q'_{\lambda_2} \right)' - ((BP_{\lambda_1})' Q_{\lambda_2}))') \, dx$$

$$= \left[(AP_{\lambda_1} Q_{\lambda_2}) + \frac{1}{2}\left((BP_{\lambda_1}) Q'_{\lambda_2} - (BP_{\lambda_1})' Q_{\lambda_2}) \right) \right]_a^b = 0$$

$$= \left[((AP_{\lambda_1} + \frac{1}{2}\left((BP_{\lambda_1})) Q'_{\lambda_2} - (BP_{\lambda_1})' Q_{\lambda_2}) \right) \right]_a^b = 0$$

$$= \left[Q_{\lambda_2} J + \frac{1}{2}(BP_{\lambda_1})) Q'_{\lambda_2} \right]_a^b \tag{86}$$

Lembrando que para a barreira refletora $J(a,t) = J(b,t) = 0$, sobra o segundo termo. Usando $P = Qp_s$ temos que se $J = 0$ nas bordas para a corrente de P e p_s

$$\begin{aligned} 0 &= -AP + \frac{1}{2}(BP)' \\ &= -AQp_s + \frac{1}{2}(BQp_s)' \\ &= -AQp_s + \frac{1}{2}(Bp_s)'Q + \frac{1}{2}(Bp_s)Q' \\ &= (-Ap_s + \frac{1}{2}(Bp_s)')Q + \frac{1}{2}(Bp_s)Q' \\ &= J_s Q + \frac{1}{2}(Bp_s)Q' \\ 0 &= \frac{1}{2}BQ' \end{aligned} \tag{87}$$

e o segundo termo também é zero. Ainda podemos escolher a normalização dos Q_λ e escrever a relação de ortogonalidade:

$$\int_a^b P_{\lambda_1} Q_{\lambda_2} dx = \delta_{\lambda_1 \lambda_2} \tag{88}$$

Condições Iniciais

Consideramos o caso importante

$$p(x, t = 0) = \delta(x - x'), \tag{89}$$

pois a solução permite construir a solução geral.

A solução da equação de Fokker-Planck (eq 92)

$$p(x, t) = \sum_\lambda C_\lambda(t) P_\lambda(x) \tag{90}$$

Olhamos para esta expressão em $t = 0$, multiplicamos por $Q_{\lambda_1}(x)$ e integramos sobre o intervalo:

$$\begin{aligned} p(x, 0) &= \sum_\lambda C_\lambda(0) P_\lambda(x) \\ \int_a^b Q_{\lambda_1}(x)\delta(x - x') &= \sum_\lambda C_\lambda(0) \int_a^b Q_{\lambda_1}(x) P_\lambda(x) \\ Q_{\lambda_1}(x') &= \sum_\lambda C_\lambda(0) \delta_{\lambda\lambda_1} \end{aligned}$$

$$C_\lambda(0) = Q_\lambda(x') \tag{91}$$

Chegamos assim à solução formal para o problema com condições iniciais $p(x, t = t'|x't') = \delta(x - x')$, que é a função de Green

$$p(x, t|x't') = \sum_\lambda Q_\lambda(x') P_\lambda(x) e^{-\lambda(t-t')} \tag{92}$$

Para cada problema em particular, devemos encontrar os autovalores e as autofunções $P_\lambda(x)$ e $Q_\lambda(x')$ de forma a satisfazer as condições de contorno.

Note a simetria da função de Green. As autofunções P estão associadas ao ponto no futuro, as Q ao ponto no passado.

Suponha que não temos informação precisa sobre o valor de X no instante inicial t', mas só uma distribuição de probabilidade $\pi(x't')$. As regras da probabilidade nos permitem escrever

$$p(x, t) = \int dx' p(x, t|x't')\pi(x't') \tag{93}$$

poderiamos ter chegado a este resultado simplesmente usando as propriedades da função de Green, onde a fonte não é mais $\delta(x - x')$

mas $\pi(x't')$. É interessante que os conceitos de distribuição *a priori* e condições iniciais vistos desta forma são a mesma coisa.

NOTAÇÃO Pensando um pouco melhor sobre a notação que hei de mudar um dia sugiro reescrever a equação 93 acima da seguinte forma

$$p(x|t_f = t, t_i = t') = \int dx' p(x|t_f = t, t_i = t', x')\pi(x'|t') \qquad (94)$$

assim não se dá a impressão que há algo associado à probabilidade de t, mas sim que os tempos t e t' são condicionantes. É óbvio que poderia haver incerteza na medida do tempo que então teria associada uma distribuição de probabilidade. Mas não é o caso: supomos t e t' conhecidos. Assim t_i é o instante onde tenho informação inicial parcial. Para cada valor de x' temos a probabilidade de observar x em t_f, esta é função de Green da equação de Fokker-Planck. As leis da probabilidade nos dizem que para obter a distibuição de x em t devemos marginalizar a distribuição conjunta $p(x, x'|tt') = p(x|t_f = t, t_i = t', x')\pi(x'|t')$.

Mas acabo esta seção com o seguinte comentário ou provocação para que pensem. A evolução temporal descrita por $p(x, t|x't')$ poderia simplesmente ser escrita como $p(x|x')$ sem referência a um relógio externo e onde penso nos x como símbolos, não necessariamente pontos no intervalo. Suponha que sejam dados $x_a, x_b, x_c...$, e suponha que tenhamos o conjunto de $\{P(x_i|x_j)\}$. Podemos ordenar de alguma forma os símbolos e através disso gerar um relógio dizendo que a ordem define uma sequência temporal? Podemos criar o tempo num sistema de inferência? Será este um modelo válido para a geração da consciência do tempo no cérebro de um animal que tem acesso a memórias x.