

NOTAS EM MATEMÁTICA APLICADA

ISSN 2175-3385

e-ISSN 2236-5915

Volume 86, 2017

Editores

Alexandre Loureiro Madureira (Editor Chefe)

Laboratório Nacional de Computação Científica - LNCC

Petrópolis, RJ, Brasil

Amanda Liz Pacífico Manfrim Perticarrari

Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho - UNESP

Jaboticabal, SP, Brasil

Edson Luiz Cataldo Ferreira

Universidade Federal Fluminense - UFF

Niterói, RJ, Brasil

Eduardo V. O. Teixeira (Editor Executivo)

University of Central Florida - UCF

Orlando, FL, EUA

Jorge Manuel Vieira Capela

Universidade Estadual Paulista - UNESP

Araraquara, SP, Brasil

Sandra Augusta Santos

Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP

Campinas, SP, Brasil



Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional

2017

A Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional - SBMAC publica, desde as primeiras edições do evento, monografias dos cursos que são ministrados nos CNMAC.

Para a comemoração dos 25 anos da SBMAC, que ocorreu durante o XXVI CNMAC em 2003, foi criada a série **Notas em Matemática Aplicada** para publicar as monografias dos minicursos ministrados nos CNMAC, o que permaneceu até o XXXIII CNMAC em 2010.

A partir de 2011, a série passa a publicar, também, livros nas áreas de interesse da SBMAC. Os autores que submeterem textos à série Notas em Matemática Aplicada devem estar cientes de que poderão ser convidados a ministrarem minicursos nos eventos patrocinados pela SBMAC, em especial nos CNMAC, sobre assunto a que se refere o texto.

O livro deve ser preparado em **Latex (compatível com o Miktex versão 2.9)**, as **figuras em eps** e deve ter entre **80 e 150 páginas**. O texto deve ser redigido de forma clara, acompanhado de uma excelente revisão bibliográfica e de **exercícios de verificação de aprendizagem** ao final de cada capítulo.

Veja todos os títulos publicados nesta série na página
http://www.sbmac.org.br/p_notas.php

Uma introdução ao método de Monte Carlo

Fernando Brenha Ribeiro
fernando.brenha@iag.usp.br

Eder Cassola Molina
eder.molina@iag.usp.br

Departamento de Geofísica
Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas
Universidade de São Paulo



Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional

São Carlos - SP, Brasil
2017

Coordenação Editorial: Igor Leite Freire

Coordenação Editorial da Série: Alexandre L. Madureira

Editora: SBMAC

Capa: Matheus Botossi Trindade

Patrocínio: SBMAC

Copyright ©2017 by Fernando Brenha Ribeiro e Eder Cassola Molina. Direitos reservados, 2017 pela SBMAC. A publicação nesta série não impede o autor de publicar parte ou a totalidade da obra por outra editora, em qualquer meio, desde que faça citação à edição original.

Catálogo elaborado pela Biblioteca do IBILCE/UNESP
Bibliotecária: Maria Luiza Fernandes Jardim Froner

Brenha Ribeiro, Fernando

Uma introdução ao Método de Monte Carlo - São Carlos, SP :
SBMAC, 2017, 130 p., 21.5 cm - (Notas em Matemática
Aplicada; v. 86)

ISBN 978-85-8215-083-2 e-ISBN 978-85-8215-082-5

1. Método de Monte Carlo 2. Integração de Monte Carlo
3. Solução de sistemas lineares.

I. Brenha Ribeiro, F II. Molina, E. C. IV. Título. V. Série

CDD - 51

A minha esposa Ivonete.
Aos meus filhos Paula, Bruna e Celso e a meu neto João
(FBR)
Aos meus filhos Aiche, André, Arthur e Enzo
(ECM)

Agradecimentos

Os autores desejam expressar seu agradecimento ao Prof. Dr. Marcelo Belentani de Bianchi, do Departamento de Geofísica do Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas da USP pela indispensável ajuda na preparação final das figuras, na preparação final do texto completo e pela leitura crítica do texto. Mais do que isso, os autores agradecem o Prof. Bianchi pela orientação sobre o uso do editor de texto Latex e pela assistência na solução de diversos problemas que foram aparecendo ao longo do trabalho de edição. Sem essa ajuda, este trabalho não teria sido concluído a tempo.

Fernando Brenha Ribeiro gostaria de agradecer em especial à sua esposa, Ivonete, pela paciência demonstrada e pelo apoio indispensáveis não só ao desenvolvimento deste projeto, mas a toda a sua carreira.

Conteúdo

Prefácio	xiii
1 Introdução	1
1.1 Algoritmos determinísticos e cálculos probabilísticos	1
1.2 A origem do Método de Monte Carlo	4
1.3 Exercício	6
2 Probabilidade e variáveis aleatórias	7
2.1 Introdução, probabilidade definida	
pela frequência	7
2.2 A definição clássica da probabilidade	8
2.2.1 Eventos mutuamente exclusivos, probabilidade condicional e	
eventos independentes	9
2.3 Definição axiomática de probabilidade	10
2.4 Igualdade entre eventos	12
2.5 Classes de eventos	13
2.6 Definição de campo de probabilidade	13
2.7 Definição axiomática de um experimento aleatório	14
2.7.1 Espaços contáveis	15
2.7.2 Espaços não contáveis	15
2.8 O conceito de variável aleatória	17
2.9 Função distribuição de probabilidade e função densidade de probabi-	
lidade	18
2.9.1 Distribuição de probabilidade condicional	20
2.10 Exercícios	21
2.11 Apêndice: O conceito de função	23
3 Funções de variáveis aleatórias	25
3.1 Funções de uma variável aleatória	25
3.1.1 A função distribuição de probabilidade da variável aleatória	
$Y(v) = g(X(v))$	26
3.1.2 Relação entre as densidades de probabilidade de $X(v)$ e de	
$Y(v) = g(X(v))$	28
3.1.3 Esperança matemática, variância, momentos de ordem superior	31
3.1.4 Média condicional	32
3.1.5 A esperança matemática de $Y(v) = g(X(v))$	33
3.1.6 Variância e momentos de ordem superior	34
3.1.7 Função característica e função geratriz de momento	35
3.2 Duas variáveis aleatórias	36

3.2.1	Independência estatística	39
3.2.2	Independência entre experimentos aleatórios	39
3.3	Função de duas variáveis aleatórias	40
3.4	Duas funções de duas variáveis aleatórias	41
3.5	Valor esperado, covariância e momentos de ordem superior para funções de duas variáveis aleatórias	42
3.6	Vetores de variáveis aleatórias	44
3.6.1	Matriz de covariância	46
3.7	Processos estocásticos	48
3.7.1	Valor médio, correlação	48
3.7.2	Processo estocástico vetorial	49
3.7.3	Processos estocásticos estacionários	50
3.8	Convergência de sequências de números aleatórios	51
3.8.1	Convergência certa e convergência quase certa	51
3.8.2	Convergência no sentido dos mínimos quadrados, convergência em probabilidade e convergência em distribuição	53
3.9	Exercícios	53
3.10	Apêndice. Domínios e regiões	56
4	Geração de números aleatórios	59
4.1	Números pseudoaleatórios - fórmula de congruência de Lehmer	59
4.2	Números pseudoaleatórios - algoritmo de Bays e Durham	67
4.3	Números pseudoaleatórios - gerador de Fibonacci	69
4.4	Números pseudoaleatórios com distribuições não uniformes.	72
4.4.1	Mudança de variáveis	72
4.4.2	Método da inversão	75
4.4.3	Método da rejeição de von Neumann	75
4.5	Exercícios	78
5	Integração pelo método de Monte Carlo	81
5.1	Uma integração simples	81
5.1.1	Um exemplo prático	82
5.2	Integrais múltiplas	85
5.2.1	Primeiro método - valor esperado	85
5.2.2	Segundo método - probabilidade	87
5.2.3	Um exemplo simples - o cálculo de um ângulo sólido	89
5.3	Exercícios	92
5.4	Apêndice - Cálculo analítico da geometria de detecção, para o caso de um arranjo cilíndrico coaxial	92
6	Processos de Markov e a solução de alguns problemas de equações lineares	95
6.1	Processos de Markov	95
6.1.1	Cadeias de Markov	96
6.2	Solução de sistemas lineares	97
6.2.1	A preparação do sistema	97
6.2.2	O experimento aleatório	99
6.2.3	A conexão entre o sistema a ser resolvido e o experimento aleatório - funcionais de trajetória	100
6.2.4	A existência de uma solução associada ao experimento aleatório	102

6.2.5	Observações	103
6.3	A aplicação prática da solução proposta	104
6.4	Exemplos de aplicação	105
6.4.1	Solução de um sistema de equações lineares	106
6.4.2	Solução de uma equação integral	108
6.4.3	A solução da equação de condução de calor	111
6.5	Exercícios	120
6.6	Apêndice 1. Valor absoluto e norma de uma matriz	120
6.7	Apêndice 2. O método das aproximações sucessivas	121

Prefácio

A ideia de redigir este volume surgiu como consequência da introdução, no primeiro semestre de 2016, de uma discussão sobre a aplicação do método de Monte Carlo na solução da equação de condução de calor na disciplina de pós graduação AGG-5923 "Transferência de Calor em Materiais Geológicos", ministrada por um dos autores (F.B.R) no Programa de Pós Graduação em Geofísica do Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas da Universidade de São Paulo. Nessa ocasião, ficou claro que a maioria dos alunos não teve contato prévio com os princípios do método de Monte Carlo e com as suas aplicações mais elementares: integração múltipla e solução de sistemas lineares. Ficou evidente também que, embora exista uma extensa literatura sobre o método de Monte Carlo e sobre as suas diversas aplicações, falta, na literatura em português, um texto introdutório, simples e conciso. O propósito desta monografia é apresentar os princípios básicos desse método.

O texto se destina a alunos dos últimos dois anos de diferentes cursos de graduação, como geofísica, física, química, matemática, engenharias e economia e a alunos de pós graduação que precisam utilizar técnicas de Monte Carlo nas suas atividades de pesquisa, mas não tiveram contato com o assunto durante a graduação, o que parece ser o caso mais comum entre os egressos das nossas universidades. Os autores esperam também que o texto seja útil ao público profissional em geral que deseje se iniciar no uso dessa metodologia.

O texto é composto de uma introdução, onde se discute a natureza dos algoritmos determinísticos e dos cálculos probabilísticos e se apresenta um resumo muito breve da história do desenvolvimento do método. Nos dois capítulos seguintes é feita uma apresentação bastante resumida dos principais resultados da teoria da probabilidade que são indispensáveis para a compreensão do restante do texto. O quarto capítulo se destina a descrever diferentes técnicas para geração de sequências de números pseudo aleatórios. O quinto capítulo apresenta o método de Monte Carlo de integração numérica, começando com um exemplo ingênuo de integração em uma única dimensão. O exemplo é introduzido para apresentar os princípios mais fundamentais do método de integração e para ressaltar, de um lado, as deficiências naturais do método e, de outro, o fato de que, normalmente, o método de integração de Monte Carlo só é realmente útil quando as técnicas mais comuns de integração numérica apresentam dificuldade de utilização. O capítulo prossegue com o problema do cálculo de integrais múltiplas, que constitui a principal aplicação do método de integração, sobretudo quando o número de variáveis a serem integradas é grande.

O último capítulo discute a aplicação do método de Monte Carlo na solução de sistemas de equações lineares e de alguns problemas com operadores lineares. O capítulo ressalta que a aplicação do método de Monte Carlo começa com a identificação de um experimento aleatório no qual uma variável aleatória, definida a

partir dos resultados elementares que formam o seu espaço amostral, é associada à solução procurada do sistema linear. Em seguida um procedimento prático para a simulação numérica do experimento aleatório é estabelecido e o método é aplicado na solução de sistemas lineares. Como exemplo final, o método é aplicado na solução da equação de condução de calor, escrita em um esquema implícito de diferenças finitas.

Todos os capítulos são acompanhados por uma lista de exercícios. A partir do capítulo 4 essa lista é formada principalmente por problemas numéricos onde o leitor deve desenvolver o seu próprio código para computador e aplicar esse código na solução do problema proposto. Isso significa que é necessária alguma familiaridade com, pelo menos, uma linguagem de programação, ou que o leitor se disponha a desenvolver essa habilidade paralelamente à leitura do texto.

São Paulo, 15 de março de 2017.

Fernando Brenha Ribeiro
Eder Cassola Molina

Capítulo 1

Introdução

1.1 Algoritmos determinísticos e cálculos probabilísticos

Considere o problema de resolver o sistema de equações lineares:

$$\begin{aligned}4x_1 + 0,24x_2 - 0,08x_3 &= 8 \\0,09x_1 + 3x_2 - 0,15x_3 &= 9 \\0,04x_1 - 0,08x_2 + 4x_3 &= 20\end{aligned}\tag{1.1.1}$$

O sistema formado pelas equações 1.1.1 pode, por exemplo, ser resolvido pela regra de Cramer que fornece formalmente uma solução na exata, obtida a partir de uma sequência finita de operações encadeadas, ou de um algoritmo, que é o conjunto dessas operações. Outro exemplo de algoritmo para a solução do sistema 1.1.1 é o método de Gauss. Nos dois casos, a solução pode ser truncada dentro de uma precisão qualquer, mas a solução, que aproximada até a quinta casa decimal é:

$$x_1 = 1,90920; x_2 = 3,19496; x_3 = 5,04481$$

é formalmente exata.

Por outro lado, o método das aproximações sucessivas fornece uma solução que, em princípio é aproximada. Nesse método, a solução do sistema é feita repetindo-se indefinidamente e de forma cíclica uma sequência de operações, ou iterações, cada uma fornecendo uma solução aproximada $s_1, s_2, \dots, s_k, \dots$. Se a matriz do sistema satisfizer algumas condições, no limite em que o número de iterações se torna indefinidamente grande, a solução converge para o valor S da solução do sistema:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} s_k = S$$

Na prática, o processo é repetido até que a solução convirja dentro de uma aproximação previamente estabelecida. A tabela 1.1 apresenta solução do sistema 1.1.1 por aproximações sucessivas no final de diferentes iterações.

Existem situações como no caso das equações:

$$\begin{aligned}x &= \exp(-0,5x) \\x &= \tan(x)\end{aligned}$$

Iteração	x_1	x_2	x_3
0	2	2	5
1	1,92	3,19	5,04
2	1,9004	3,1944	5,0446
3	1,90923	3,19495	5,04485

Tabela 1.1: Solução do sistema 1.1 por aproximações sucessivas para as três primeiras iterações

onde não é possível se obter uma solução exata de forma fechada, ou seja, uma expressão ou fórmula que permita, pelo menos em princípio, obter a solução, no caso da equação que envolve a função exponencial, ou soluções, no caso da equação que envolve a função tangente, que transformam as equações em identidades. Existe, no entanto, mais de um algoritmo iterativo que permite encontrar uma solução aproximada com qualquer precisão desejada. Na realidade a solução de qualquer uma das equações é extremamente simples. A figura 1.1 mostra a solução gráfica da equação $x = \exp(-0,5x)$, cujo valor aproximado é 0,7. A substituição desse resultado como valor inicial em um esquema iterativo de Newton fornece a solução 0,703467 com a sexta cifra exata.

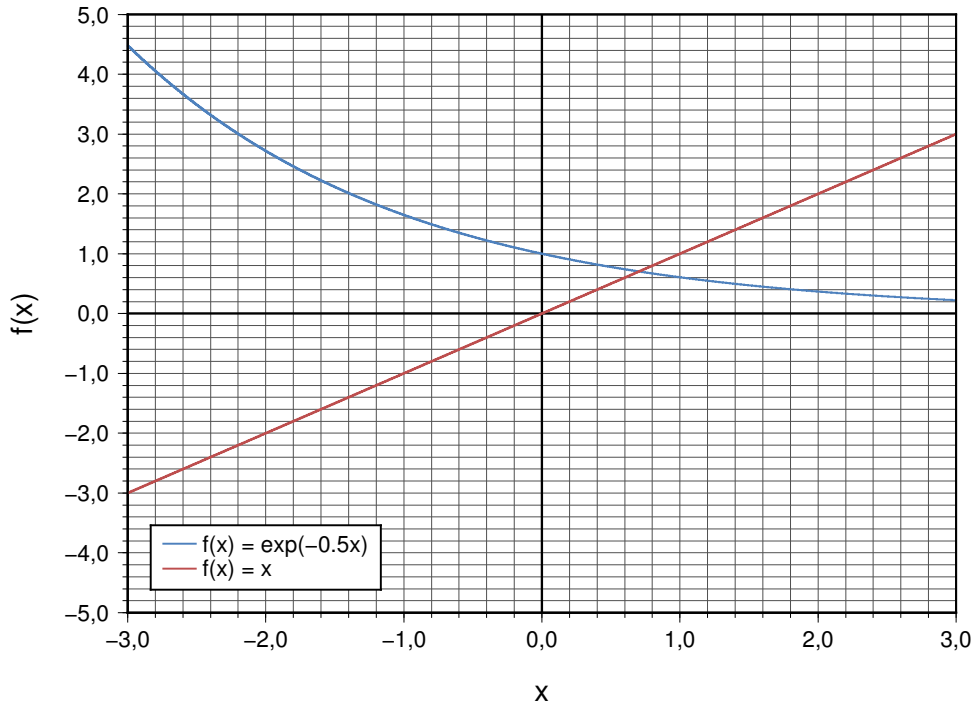


Figura 1.1: Solução gráfica da equação $x = \exp(-0,5x)$

Existem também problemas como a equação diferencial:

$$\frac{dy}{dt} = k(y^4 - y_0^4) \quad (1.1.2)$$

onde k e y_0 são constantes, com a condição inicial $y(0) = y_1$. A solução dessa equação, que pode ser obtida separando as variáveis e integrando diretamente a

equação com variáveis separadas, é:

$$kt = \frac{1}{4(y_0)^3} \ln\left[\left(\frac{y-y_0}{y+y_0}\right)\left(\frac{y_1+y_0}{y_1-y_0}\right)\right] - \frac{1}{2(y_0)^3} \left[\arctan\left(\frac{y}{y_0}\right) - \arctan\left(\frac{y_1}{y_0}\right)\right]$$

Embora a solução seja expressa em uma fórmula fechada, contendo um número finito de termos expressos por funções transcendentais elementares, esta solução é por sua vez, uma equação transcendente em y , para cada valor fixo de t . Esta equação deve ser resolvida por um processo gráfico ou iterativo. Na realidade, uma solução mais simples da equação 1.1.2 é obtida por diferenças finitas.

Todos os procedimentos de cálculo mencionados até agora são caracterizados por uma sequência de operações encadeadas, ou, como se costuma dizer, por um algoritmo determinístico, que recebe esse nome porque o resultado é determinado apenas pelo algoritmo. A aplicação repetida do procedimento ao mesmo problema fornece sempre a mesma resposta, descontando-se eventuais diferenças de arredondamento.

Os procedimentos determinísticos são os mais utilizados na matemática e nas ciências, de uma forma geral, e são a principal forma de solução de problemas da matemática aplicada e da física matemática, como a solução de equações algébricas, de equações diferenciais, integrais e íntegro-diferenciais e problemas de contorno. Existem, no entanto, problemas onde não é possível se estabelecer um algoritmo determinístico, ou, embora seja possível estabelecê-lo, ele é tão difícil de ser utilizado que a sua utilização fica muito reduzida, ou mesmo anulada. Problemas que envolvem a solução da equação de Boltzmann (ver, por exemplo, [19]; [32]), como os problemas de transporte de radiação e de nêutrons no interior de um reator nuclear, são exemplos de problemas que, com frequência, se encaixam nessa categoria.

Uma opção para a solução desses problemas é realizar um grande número de simulações com base em um experimento aleatório de forma que o valor procurado corresponda a uma variável aleatória¹ $X(v) = x$ associada ao resultado elementar v do experimento. Se o experimento for repetido k vezes, o resultado será uma sequência de números $x_1, x_2, x_3, \dots, x_k$ que são estimativas de $X(v)$. Em princípio, pode-se obter uma sequência infinita $x_1, x_2, \dots, x_k, \dots$ e a solução do problema é definida pelo limite da sequência. Uma sequência de variáveis aleatórias pode convergir em mais de um sentido. A sequência converge "em probabilidade" para a $x = X(v)$ se, dado um número real ε estritamente positivo tal que:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} P(|x - x_k| > \varepsilon) = 0$$

onde P é a probabilidade associada à variável aleatória X . A escolha da variável aleatória depende do problema que estiver sendo considerado. Um exemplo simples de uma solução desse tipo é dado pelo método da agulha de Buffon para o cálculo do número π , que será considerado mais adiante.

Os métodos de solução baseados em simulações de processos aleatórios são coletivamente conhecidos, como métodos de Monte Carlo. O nome "método de Monte Carlo" foi introduzido na literatura no final da década de 1940, mas algumas soluções de problemas físicos e matemáticos baseadas em simulações de processos aleatórios são bem anteriores a essa época. De uma forma pouco rigorosa, o método de Monte Carlo pode ser definido como o conjunto de procedimentos para solução de problemas numéricos que fazem uso de, ou recorrem a, variáveis aleatórias para simular um princípio físico ou matemático.

¹Variáveis aleatórias e funções de variáveis aleatórias são os temas centrais dos capítulos 2 e 3.

Uma das principais características do método de Monte Carlo é a necessidade utilizar números obtidos de extrações de processos aleatórios com distribuição de probabilidade definida. Esses números podem ser obtidos a partir de processos físicos, como por exemplo, o número de contagens registrado por um contador Geiger-Müller em um intervalo de tempo fixo, produzido pela detecção de radiação proveniente de uma fonte de atividade constante. Na realidade, proveniente de uma fonte composta por um radionuclídeo de meia vida muito longa quando comparada com intervalo de tempo em que a experiência é conduzida. De uma forma geral, embora as sequências de valores obtidos dessa forma sejam realmente sequências aleatórias, frequentemente, ou quase sempre, é pouco prático adotar esse expediente.

Uma forma de contornar esse problema é gerar, numericamente, uma sequência de valores aleatórios. O problema é que não é possível gerar numericamente um conjunto de números aleatórios porque os procedimentos numéricos que podem ser criados são todos eles determinísticos. O que se pode fazer é criar um conjunto de números que parecem ser aleatórios dependendo da forma com que são vistos, ou testados. Esses números são chamados de pseudoaleatórios e a forma de geração de uma sequência desse tipo é o assunto central do capítulo 4.

1.2 A origem do Método de Monte Carlo

A solução de problemas físicos e matemáticos baseados em simulações de processos aleatórios não é muito recente, embora existam muito poucos exemplos desse tipo de abordagem antes da metade do século XX. Um dos exemplos mais antigos já foi mencionado. Trata-se do método da agulha de Buffon, no qual uma agulha com comprimento $2a$ é deixada cair ao acaso sobre um padrão de linhas paralelas com espaçamento $2b$, maior do que o comprimento da agulha. Pode ser demonstrado que a probabilidade p da agulha interceptar uma das linhas paralelas é:

$$p = \frac{2a}{\pi b} \quad (1.2.3)$$

Repetindo o experimento de deixar a agulha cair sobre o padrão por um número grande de vezes n e contando o número de vezes em que a agulha intercepta uma das linhas $n_{sucesso}$, a probabilidade p pode ser estimada pela frequência do sucesso da experiência, que é interceptar as linhas, na forma (o capítulo 2 se dedica a formalizar o conceito de probabilidade):

$$p = \frac{n_{sucesso}}{n}$$

Com essa estimativa de p , o número π pode ser estimado.

O termo Monte Carlo para se referir à utilização de experimentos aleatórios na solução aproximada de problemas da física e da matemática foi cunhado na metade do século XX, logo após o final da Segunda Guerra Mundial. A história que vai ser contada aqui corresponde ao relato que pode ser encontrado com uma riqueza muito maior de detalhes em [31] e [7].

Como é conhecido da história do século passado (ver, por exemplo, [26]), durante a Segunda Guerra foram desenvolvidas, nos Estados Unidos, as primeiras armas atômicas. Esse desenvolvimento foi feito à custa de se concentrar em um único projeto, o Projeto Manhattan, um número grande de cientistas e técnicos, muitos deles imigrantes de países da Europa Central, que se refugiaram na Inglaterra e nos Estados Unidos durante a guerra. A equipe do projeto Manhattan incluía cientistas

de peso da época como Enrico Fermi , Robert Oppenheimer, Hans Bethe e Ernest Lawrence . A maior parte desses cientistas e técnicos foi concentrada no que hoje é o Laboratório Nacional de Los Alamos, no Novo México.

Entre os membros da equipe de Los Alamos estava o matemático polonês Stanislaw Ulam que, entre outras atividades, trabalhou com o problema da multiplicação de nêutrons durante a reação em cadeia que leva à explosão da bomba atômica. Logo em seguida ao final da guerra, vários cientistas se desligaram do laboratório de Los Alamos. Alguns voltaram para as suas instituições de origem e outros, como Ulam que era imigrante, receberam convite para trabalhar em universidades americanas. Ulam foi convidado pela Universidade do Sul da Califórnia (University of Southern California - USC), em Los Angeles.

Acontece que logo em seguida à sua chegada em Los Angeles, Ulam teve uma encefalite viral que quase lhe custou a vida. Pego de surpresa em plena mudança de emprego e de cidade, Ulam acabou sendo recontratado pelo laboratório de Los Alamos e retornando ao Novo México. Antes disso, no entanto, Ulam permaneceu em uma longa convalescença na Califórnia.

Os médicos recomendaram que Ulam não se dedicasse, por algum tempo, a tarefas que exigissem um esforço intelectual muito grande e, como passatempo, ele se ocupou com um jogo de cartas de paciência, conhecido em inglês como "Canfield Solitaire". Não demorou muito para que Ulam começasse a tentar estabelecer, usando os métodos da análise combinatória, as probabilidades de se ter sucesso no jogo, que é essencialmente, um jogo de azar. Também não demorou muito para ele concluir que o problema tinha solução praticamente impossível, devido ao crescimento muito rápido das possíveis combinações durante o jogo. Ele concluiu que, no caso do jogo, era melhor se satisfazer com a simples estimativa dada pela frequência de sucessos em um número relativamente grande de tentativas.

Ulam percebeu um paralelo entre o problema do jogo de paciência e processos envolvendo a ramificação de eventos, como é o caso da geração e multiplicação de nêutrons em materiais que podem sofrer fissão nuclear, como o urânio. O processo é complicado porque envolve a probabilidade de um nêutron ser absorvido por um núcleo do material em questão, a probabilidade dessa absorção resultar em fissão e na produção de mais nêutrons, a probabilidade dos nêutrons não serem absorvidos mas apenas mudarem a direção e a velocidade do seu movimento após a colisão com um núcleo e, eventualmente, escapar do material físsil.

Como consequência desse paralelo, Ulam propôs que alguns problemas de solução muito difícil poderiam ser tratados de forma análoga ao problema de se estimar a probabilidade de sucesso no jogo de azar. Em vez de se procurar uma solução matematicamente rigorosa, fazer estimativas relativamente simples da solução baseadas em um número relativamente grande de experimentos numéricos. De volta a Los Alamos, Ulam discutiu o problema com John von Neumann, que era um matemático húngaro de grande prestígio internacional e que havia se estabelecido nos Estados Unidos antes da guerra. von Neumann também participou do projeto Manhattan. Da colaboração entre Ulam e von Neumann, que desenvolveram juntos os aspectos matemáticos do problema, e da montagem de uma equipe de pesquisadores e técnicos que começavam a utilizar os primeiros computadores eletrônicos, surgiu o que hoje se chama de método de Monte Carlo. O nome do método, aparentemente, foi dado por um dos principais membros dessa equipe, Nicholas Metropolis , devido ao uso de números gerados ao acaso, como em um jogo de azar, nos algoritmos que foram sendo desenvolvidos.

O uso do método de Monte Carlo se expandiu rapidamente nos anos 1950 e 1960. Essa expansão foi, de certa forma exagerada, no sentido que muitos problemas que

foram tratados por Monte Carlo têm solução mais econômica, precisa e eficiente por métodos determinísticos. O método de Monte Carlo, na realidade, é útil naqueles problemas onde os métodos convencionais não funcionam, ou funcionam mal. Existem várias situações como essa, não só na física e na matemática, mas também em outras ciências, como a biologia e a economia.

1.3 Exercício

1. Faça o experimento de Buffon e obtenha a probabilidade de que a agulha intercepte o padrão de linhas paralelas. Usando a equação 1.2.3 estime o valor de π .

Capítulo 2

Probabilidade e variáveis aleatórias

2.1 Introdução, probabilidade definida pela frequência

Experimentos aleatórios são experimentos que fornecem, mantidas constantes as condições em que são realizados, resultados que podem se excluir entre si e que não podem ser previstos de forma definitiva. Em contraposição aos processos aleatórios se colocam os processos determinísticos, os quais, mantidas as condições, fornecem o mesmo resultado toda vez em que são realizados.

O jogo de dados é um exemplo de processo aleatório, uma vez que não é possível prever qual será o resultado de cada lançamento, considerando, é claro, que os dados sejam honestos. Lançamentos distintos fornecem com frequência resultados distintos. Por outro lado, o lançamento oblíquo de uma bola de aço, sempre com o mesmo ângulo em relação à horizontal e com a mesma velocidade em um campo gravitacional vertical fornece sempre o mesmo alcance.

Existem situações em que, embora em princípio seja possível descrever um processo de forma determinística, é conveniente, ou mesmo mandatório, adotar uma descrição considerando o processo como sendo aleatório. Em princípio, se poderia descrever de forma determinística o movimento de todas as moléculas de um gás mantido a pressão e a temperatura constantes. No entanto, o número de equações seria da ordem de três vezes o número de Avogrado e, mesmo que se conseguisse obter a solução desse conjunto de equações, a sua interpretação seria virtualmente impossível.

Alguns processos aleatórios têm a propriedade de poderem ser caracterizados por um número pequeno de propriedades. Tipicamente essas propriedades correspondem a valores que podem ser calculados a partir de um número grande de realizações do processo. O comportamento de um gás é descrito de forma satisfatória pela temperatura e pela pressão, que representam o valor médio da energia cinética das moléculas e do momento linear que elas transferem para a parede do recipiente que o contém.

Um exemplo de um valor que pode ser obtido de um número grande de experimentos é o que se costuma chamar de probabilidade baseada na frequência relativa. Considere um experimento simples de lançamento simultâneo de dois dados e considere que o resultado desejado, para se ganhar uma aposta, por exemplo, seja obter

os números 4 e 6. Pode-se estimar a chance de se ganhar a aposta repetindo, antes de enfrentar um adversário, o lançamento dos dois dados por um número grande de vezes. Fica aqui entendido que o experimento deve ser realizado com os mesmos dados a serem utilizados na aposta. A probabilidade $P_{sucesso}$ de se obter os números 4 e 6 é estimada como sendo a razão entre o número de sucessos obtidos $n_{sucesso}$ e o número total de tentativas, ou de lançamentos, n_{total} :

$$P_{sucesso} = \frac{n_{sucesso}}{n_{total}} \quad (2.1.1)$$

Se a razão definida na equação 2.1.1 tender a um número fixo à medida em que o número de lançamentos se torna cada vez maior, $P_{sucesso}$ fornece uma estimativa da probabilidade de sucesso definida pela frequência relativa do sucesso.

O tratamento matemático dos processos aleatórios recebe o nome de teoria da probabilidade, que é o assunto que será resumido, em muito breves pinceladas, a seguir. Para uma apresentação rigorosa e em profundidade da teoria da probabilidade se recomenda a leitura de [9], [10], [21] ou [23].

2.2 A definição clássica da probabilidade

Considere um experimento aleatório. Chama-se de conjunto universo V do experimento ao conjunto formado por todos os resultados possíveis desse experimento. Por outro lado, qualquer subconjunto do conjunto universo é chamado de evento. O resultado de uma única realização do experimento, que é um evento composto por um único elemento, é, algumas vezes, chamado de tentativa, de resultado experimental, ou de evento elementar.

Usando a notação da teoria dos conjuntos, se A for um evento particular de um experimento, então o seu evento complementar \bar{A} é definido como:

$$\bar{A} = V - A \quad (2.2.2)$$

onde o resultado da diferença entre os conjuntos V e A consiste no subconjunto de V formado pelos elementos de V que não pertencem a A :

$$\bar{A} = \{\text{todos elementos } v \in V \mid v \notin A\}$$

A probabilidade de um evento A representada por $P(A)$ de um experimento que tem o conjunto universo V pode ser definida de forma clássica como sendo o número de elementos contidos em A representado por $n(A)$ dividido pelo número de elementos contidos em V :

$$P(A) = \frac{n(A)}{n(V)}$$

Uma vez que, por definição o conjunto vazio \emptyset , aquele conjunto que não possui elemento algum, é um subconjunto de qualquer outro conjunto e A é um subconjunto de V , ou seja, $\emptyset \subset A \subset V$, tem-se:

$$P(\emptyset) = 0 \text{ e } P(V) = 1$$

e a probabilidade de A é tal que:

$$0 \leq P(A) \leq 1$$

onde as igualdades só valem para A vazio ou para A igual ao conjunto universo.

Em substituição da definição clássica da probabilidade pode-se introduzir uma definição axiomática que será apresentada um pouco mais adiante.

Voltando ao exemplo do jogo de dois dados, o conjunto universo é formado por todos os pares (a, b) , com a e b podendo assumir os valores $(1, 2, 3, 4, 5, 6)$. Os pares não são ordenados ou seja, $(1, 5)$ e $(5, 1)$, por exemplo, representam o mesmo resultado. O número de elementos do conjunto universo é o número de pares que podem ser formados com o lançamento dos dois dados. Esse número é igual a 36, seis resultados para cada dado, menos 15 para remover a dupla representação de um mesmo resultado. Esse número corresponde ao número de combinações simples, dos valores das seis faces do dado, tomados dois a dois. Portanto, o número de elementos do conjunto universo é 21. Como o resultado que leva à vitória no jogo é $(4, 6)$, a probabilidade de se ganhar a aposta é $1/21$, pouco menos do que 5 por cento.

Dados dois eventos A e B , a probabilidade da união dos dois eventos é:

$$P(A \cup B) = P(A) + P(B) - P(A \cap B) \quad (2.2.3)$$

Lembrando rapidamente, o conjunto formado pela união de dois conjuntos A e B , operação representada por \cup , é o conjunto cujos elementos são os elementos que pertencem a A ou pertencem a B , ou pertencem aos dois conjuntos simultaneamente. O conjunto formado pela intersecção de dois conjuntos A e B , operação representada por \cap , é o conjunto formado pelos elementos que pertencem simultaneamente a A e a B .

O resultado expresso na equação 2.2.3 é consequência direta da definição de probabilidade. Se a intersecção de A e B for diferente do conjunto vazio \emptyset a soma da probabilidade de A com a probabilidade de B inclui duas vezes a probabilidade de $A \cap B$.

2.2.1 Eventos mutuamente exclusivos, probabilidade condicional e eventos independentes

Dois eventos são mutuamente exclusivos quando:

$$A \cap B = \emptyset \quad (2.2.4)$$

ou seja, A e B não têm elementos em comum: se o experimento fornece um resultado que pertence a A , esse resultado não pertence a B . Nesse caso:

$$P(A \cup B) = P(A) + P(B) \quad (2.2.5)$$

Define-se probabilidade condicional $P(A | B)$ como sendo a probabilidade de que o evento A ocorra, uma vez que o evento B já ocorreu. Isso significa que, nesse caso, o conjunto universo se restringe ao evento B e o evento que inclui os elementos pertencentes a A é mais restrito e definido por $A \cap B$. A probabilidade $P(A | B)$ é então dada por:

$$P(A | B) = \frac{n(A \cap B)}{n(B)} = \frac{\frac{n(A \cap B)}{n(V)}}{\frac{n(B)}{n(V)}} = \frac{P(A \cap B)}{P(B)}$$

ou:

$$P(A \cap B) = P(A | B)P(B) \quad (2.2.6)$$

Da mesma forma:

$$P(B \cap A) = P(B | A)P(A)$$

e como a a operação intersecção é comutativa:

$$A \cap B = B \cap A$$

tem-se:

$$P(A \cap B) = P(A | B)P(B) = P(B | A)P(A)$$

Dois eventos são chamados de eventos independentes quando:

$$P(A | B) = P(A) \text{ e } P(B | A) = P(B)$$

ou seja, quando a probabilidade do evento A não é condicionada à probabilidade de B e a probabilidade de B não é condicionada à probabilidade de A . Nesse caso:

$$P(A \cap B) = P(A)P(B) \quad (2.2.7)$$

A probabilidade de dois eventos independentes é igual ao produto das probabilidades de cada evento.

2.3 Definição axiomática de probabilidade

O conceito clássico de probabilidade leva a uma série de inconsistências na teoria desenvolvida a partir desse conceito. Uma discussão detalhada sobre essas inconsistências, que foge muito do objetivo deste texto, pode ser encontrada em [23]. Os problemas gerados pela definição clássica de probabilidade são resolvidos quando se adota uma definição axiomática da probabilidade. Trata-se de um desenvolvimento relativamente recente devido, principalmente, a A. Kolmogorov no início da década de 1930.

O tratamento axiomático da teoria da probabilidade se inicia definindo o conjunto universo como sendo o evento de probabilidade igual a um, aquele que ocorre com certeza. O conjunto vazio \emptyset é definido como o evento impossível. Três axiomas básicos são adotados:

- I. Sendo V o conjunto universo, $P(V) = 1$. V é também chamado de evento certo ou de espaço de probabilidade.
- II. Sendo A um evento de V , $P(A) \geq 0$
- III. Se A e B são eventos de V tais que $A \cap B = \emptyset$, então $P(A \cup B) = P(A) + P(B)$

Decorre desses axiomas que:

$$P(\emptyset) = 0$$

uma vez que $A \cap \emptyset = \emptyset$ e $A \cup \emptyset = A$. Note que aqui surge uma diferença importante em relação à definição clássica. Na definição clássica se $P(A)$ é igual a zero, A é o

conjunto vazio \emptyset . Na definição axiomática isso não é dito. O que é dito é que $P(\emptyset)$ é igual a zero, mas não exclui a possibilidade de A diferente de \emptyset ter probabilidade nula.

Por outro lado, para qualquer evento A , tem-se da equação 2.2.2 que:

$$V = A \cup \bar{A} \text{ e } A \cap \bar{A} = \emptyset$$

de onde (axioma III):

$$P(A \cup \bar{A}) = P(A) + P(\bar{A}) = 1$$

Uma vez que as probabilidades $P(A)$ e $P(\bar{A})$ são números positivos (axioma II):

$$P(A) \leq 1 \text{ e } P(\bar{A}) \leq 1$$

Considerando dois eventos A e B tais que $A \cap B \neq \emptyset$, o evento:

$$C = \bar{A} \cap B$$

tem intersecção vazia com A e:

$$A \cap (\bar{A} \cap B) = \emptyset$$

Como:

$$A \cup B = A \cup (\bar{A} \cap B)$$

tem-se:

$$P(A \cup B) = P(A \cup (\bar{A} \cap B)) = P(A) + P(\bar{A} \cap B) \quad (2.3.8)$$

Por outro lado:

$$B = (A \cap B) \cup (\bar{A} \cap B)$$

e:

$$(A \cap B) \cap (\bar{A} \cap B) = \emptyset$$

e, portanto:

$$P(B) = P(A \cap B) + P(\bar{A} \cap B) \quad (2.3.9)$$

Eliminando $P(\bar{A} \cap B)$ das equações 2.3.8 e 2.3.9 obtém-se a equação 2.2.3.

Para concluir, a probabilidade condicional na definição axiomática de probabilidade é definida como sendo:

$$P(A | B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)} \quad (2.3.10)$$

desde que $P(B)$ seja diferente de zero e que corresponde à equação 2.2.6. É importante notar a diferença entre os conceitos de probabilidade condicional. Enquanto que na formulação clássica a definição de probabilidade condicional conduz à equação 2.2.6, na formulação axiomática a equação 2.2.6 é a definição de probabilidade condicional.

2.4 Igualdade entre eventos

Dois eventos são iguais quando contêm os mesmos elementos. Dois eventos A e B são iguais em probabilidade quando $P(A)$ é igual a $P(B)$. Quando se diz que dois eventos são iguais em probabilidade, nada se pode dizer sobre a probabilidade de $A \cap B$, os dois eventos podem ser inclusive mutuamente exclusivos.

A diferença simétrica entre dois conjuntos A e B é definida como sendo o conjunto formado pela união do subconjunto dos elementos de A que não pertencem a B , ou seja, a diferença de conjuntos $A - B$, com o subconjunto dos elementos de B que não pertencem a A , ou seja $B - A$. Utilizando a notação Δ para identificar a diferença simétrica:

$$A \Delta B = (A - B) \cup (B - A)$$

A operação Δ pode também ser escrita como:

$$A \Delta B = (A \cup B) \cap (\overline{A \cap B}) = (A \cap \bar{B}) \cup (\bar{A} \cap B) \quad (2.4.11)$$

A probabilidade de ocorrência do evento diferença simétrica entre os eventos A e B pode ser inferida da própria definição de Δ :

$$P(A \Delta B) = P(A) + P(B) - 2P(A \cap B)$$

A construção de um diagrama de Venn ajuda a demonstrar isso.

Impondo que a probabilidade da diferença simétrica entre os eventos A e B seja nula tem-se:

$$P(A) + P(B) = 2P(A \cap B) \quad (2.4.12)$$

Por outro lado, a imposição de que:

$$P(A \Delta B) = 0 \quad (2.4.13)$$

junto com a equação 2.2.3 leva a:

$$P(A \cup B) = P(A \cap B)$$

Isso significa que, quando a diferença simétrica entre A e B é igual a zero, o evento A condiciona o evento B e o evento B condiciona o evento A da mesma forma. Ou seja, a probabilidade de B , dado que A aconteceu é igual à probabilidade de A dado que B aconteceu, ou:

$$P(B | A) = P(A | B) \quad (2.4.14)$$

Usando a definição de probabilidade condicional:

$$P(A \cap B) = P(A | B)P(B) \quad e \quad P(B \cap A) = P(B | A)P(A)$$

lembrando que a operação interseção é comutativa e usando a equação 2.4.14 tem-se que $P(A) = P(B)$. Dessa igualdade e da equação 2.4.12 conclui-se que:

$$P(A) = P(B) = P(A \cap B) \quad (2.4.15)$$

quando $P(A \Delta B) = 0$.

Além da solução trivial em que $A = B$, A sendo vazio ou não, existem duas situações notáveis em que a equação 2.4.15 é satisfeita. Na primeira, um dos eventos, B , por exemplo, é vazio, mas o outro não. Nesse caso, para que a equação seja satisfeita é necessário que $P(A)$ seja nula. Por outro lado, se $P(A) = P(B) = 1$, a equação 2.4.15 também é satisfeita.

Usando a equação 2.2.3 nessa hipótese particular:

$$P(A \cup B) = 1 + 1 - P(A \cap B)$$

Como $P(A \cup B)$ é no máximo igual a 1, $P(A \cap B)$ tem que ser no mínimo igual a 1. No entanto, como $P(A \cap B)$ também é no máximo igual a 1, para que a equação 2.2.3 seja satisfeita $P(A \cap B)$ tem que ser igual a 1, o que fixa $P(A \cup B)$ em 1 também, e a equação 2.4.15 é satisfeita. É importante notar que essas duas situações não são as únicas que satisfazem a equação 2.4.15.

A equação 2.4.13, ou de forma equivalente, a equação 2.4.15, define um terceiro tipo de igualdade entre probabilidades. *Dois conjuntos A e B são iguais com probabilidade 1*, quando a equação 2.4.13, ou de forma equivalente, a equação 2.4.15 é satisfeita [23]. No entanto, dizer que A e B são iguais com **probabilidade 1**, não significa, necessariamente, que $P(A) = P(B) = 1$. Igualdade de dois conjuntos A e B com **probabilidade 1** significa que as probabilidades condicionais $P(A | B)$ e $P(B | A)$ são iguais a um.

2.5 Classes de eventos

Eventos são, por definição, subconjuntos de V , mas o conjunto de todos os eventos não precisa corresponder a todos os subconjuntos que possam ser formados a partir de V . O que o primeiro axioma da teoria das probabilidades estabelece é que $P(V)$ seja igual a 1. Isso significa que os eventos podem corresponder a um grupo, ou a uma classe particular de subconjuntos de V , desde que a probabilidade de ocorrer qualquer um dos eventos definidos em V seja igual a 1.

Uma classe de subconjuntos de V é um conjunto de diferentes conjuntos de V que conservam pelo menos uma característica comum. Por exemplo, o conjunto formado por todos os conjuntos disjuntos que podem ser formados a partir de V é uma classe de subconjuntos de V . A característica comum é o fato de serem conjuntos disjuntos entre si.

Na teoria da probabilidade o interesse não se limita às probabilidades dos diversos eventos contidos em V , mas se estende à união e à intersecção dos diversos eventos. Por isso, os eventos precisam pertencer a uma classe particular F de subconjuntos de V , caracterizada pelo seguinte fato: se A e B pertencem a F , então $A \cup B$ e $A \cap B$ também pertencem a F .

A classe dos subconjuntos formada por todos os conjuntos disjuntos que podem ser selecionados de V é um exemplo de classe que não satisfaz as condições necessárias à teoria das probabilidades, uma vez que a união de dois conjuntos A e B dessa classe forma um conjunto que tem intersecção com A e com B .

2.6 Definição de campo de probabilidade

Um campo de probabilidade F é uma classe não vazia de V que satisfaz as seguintes propriedades:

- i- Se um conjunto A pertence a F , $A \in F$, então, $\bar{A} \in F$.

ii- Se $A \in F$ e $B \in F$, então, $(A \cup B) \in F$

Dessas duas condições, segue que, se A e B pertencem a F então:

$$\bar{A} \cup B \in F \quad A \cup \bar{B} \in F \quad \bar{A} \cup \bar{B} \in F$$

e:

$$\overline{\bar{A} \cup \bar{B}} = A \cap B \in F$$

Além disso, $V = A \cup \bar{A}$ e $A \cap \bar{A} = \emptyset$ pertencem a F . Portanto, um campo de probabilidade é uma classe de eventos que satisfaz as condições necessárias à teoria da probabilidade.

A definição de campo de probabilidade considera, ainda que de forma implícita, que todos os seus elementos possam ser representados na forma de uniões e intersecções de um número finito de subconjuntos do campo. Algumas vezes é necessário realizar não apenas uniões e intersecções, mas considerar limites dessas operações com o número de subconjuntos tendendo ao infinito.

Considere que $\{A_1, A_2, A_3, \dots, A_k, \dots\}$ seja uma sequência infinita de elementos de um campo de probabilidade. Se a união e a intersecção desses elementos também pertencer ao campo de probabilidade, então o campo recebe o nome de campo de Borel.

Se $\{A_1, A_2, A_3, \dots, A_k\}$ for um conjunto de n conjuntos disjuntos:

$$P(A_1 \cup A_2 \cup A_3 \cup \dots \cup A_k) = P(A_1) + P(A_2) + P(A_3) + \dots + P(A_k) \quad (2.6.16)$$

A equação 2.6.16 não se estende a um conjunto $\{A_1, A_2, A_3, \dots, A_k, \dots\}$ infinito de eventos. Um axioma adicional, ou uma generalização do axioma III, tem que ser introduzido na forma:

axioma IV - Se $\{A_1, A_2, A_3, \dots, A_k, \dots\}$ for uma sequência infinita formada por eventos mutuamente exclusivos, então:

$$P(A_1 \cup A_2 \cup A_3 \cup \dots \cup A_k \cup \dots) = P(A_1) + P(A_2) + P(A_3) + \dots + P(A_k) + \dots$$

2.7 Definição axiomática de um experimento aleatório

Um experimento aleatório é definido por:

- a) conjunto E de todos os resultados experimentais (tentativas ou eventos elementares)
- b) campo de Borel de todos os eventos de E
- c) probabilidades desses eventos

2.7.1 Espaços contáveis

Um conjunto A é chamado de conjunto finito com n elementos quando se pode estabelecer uma função bijetora (ver apêndice deste capítulo) entre o subconjunto dos números naturais $\{1, 2, 3, \dots, n\}$ e os elementos do conjunto A . Um conjunto A é chamado de conjunto infinito, mas enumerável, quando se pode estabelecer uma função bijetora entre o conjunto dos números naturais e os elementos de A .

Se o conjunto $E = \{e_j\}$ dos resultados de um experimento aleatório é formado por um conjunto finito com n elementos ou por um conjunto infinito, mas enumerável, a probabilidade de qualquer evento pertencente ao campo de Borel associado a E pode ser expressa em termos das probabilidades de cada resultado experimental $P(e_j) = p_j$.

Dos axiomas da teoria da probabilidade se um conjunto E é formado por n eventos elementares, a cada evento elementar e_i se associa uma probabilidade:

$$P(e_i) = p_i \geq 0$$

com:

$$\sum_{i=1}^n P(e_i) = 1$$

No caso do conjunto E ser infinito, mas enumerável, a somatória se estende sobre todo o conjunto dos números naturais.

A probabilidade de qualquer evento A_k pode ser gerado a partir de m eventos elementares $\{e_{k_i}\}$ de E , com $\{i = 1, 2, 3, \dots, m\}$ de E , é dada por:

$$P(A_k) = \sum_{i=1}^m P(e_{k_i})$$

2.7.2 Espaços não contáveis

Um espaço de probabilidade V pode ser formado por um conjunto não contável de pontos, como, por exemplo, uma reta ou um segmento de reta, uma área, um volume ou subconjuntos equivalentes em um espaço com n , $n \geq 3$, dimensões. Em casos como esses não é possível definir uma probabilidade para cada subconjunto de V .

Considerando inicialmente o caso da reta real, pode-se definir como evento para construir um espaço de probabilidade toda e qualquer semirreta I :

$$I = \{x = \text{número real} \mid x \leq a, a \text{ real fixo}\} \quad (2.7.17)$$

Sendo a reta real \mathbb{R} o conjunto universo, qualquer que seja I tem-se que:

$$I \in \mathbb{R} \quad \text{e} \quad \bar{I} \in \mathbb{R}$$

e, além disso, se I e J pertencem a \mathbb{R} , então:

$$I \cup J \in \mathbb{R}$$

e \mathbb{R} é um campo de probabilidade. Por outro lado, se $\{I_1, I_2, \dots, I_k, \dots\}$ for uma sequência infinita de eventos de \mathbb{R} , todas as suas uniões e intersecções pertencem a \mathbb{R} e, portanto, \mathbb{R} é um campo de Borel.

Supondo que se tenha uma função real f , tal que $f(x) \geq 0$, absolutamente integrável em $(-\infty, \infty)$, de forma que se pode escrever, sem perda de generalidade que:

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

A probabilidade do evento I definido na equação 2.7.17 pode ser definida como:

$$P\{x \leq a\} = \int_{-\infty}^a f(x)dx$$

Seguindo o que os axiomas da teoria da probabilidade estabelecem:

1 axioma I

$$P\{\mathbb{R}\} = \lim_{a \rightarrow \infty} P\{x \leq a\} = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx = 1$$

2 axioma II

$$P\{x \leq a\} = \int_{-\infty}^a f(x)dx \geq 0$$

para qualquer A real, ou seja, para qualquer evento contido em \mathbb{R} .

A intersecção de dois eventos $x \leq a$ e $x \leq b$, com $a \leq b$ é um evento do espaço de probabilidade e:

$$P((x \leq a) \cap (x \leq b)) = \int_{-\infty}^b f(x)dx - \int_{-\infty}^a f(x)dx = \int_a^b f(x)dx$$

Os eventos $a \leq x \leq b$ e $c \leq x \leq d$, com $a < b < c < d$ são eventos mutuamente exclusivos uma vez que não há intersecção entre os dois intervalos:

$$(a < x \leq b) \cap (c < x \leq d) = \emptyset$$

A probabilidade da união dos dois eventos mutuamente exclusivos é:

$$P((a < x \leq b) \cup (c < x \leq d)) = (\int_{-\infty}^b f(x)dx - \int_{-\infty}^a f(x)dx) + (\int_{-\infty}^d f(x)dx - \int_{-\infty}^c f(x)dx)$$

ou:

$$P((a < x \leq b) \cup (c < x \leq d)) = (\int_a^b f(x)dx + \int_c^d f(x)dx) = P(a < x \leq b) + P(c < x \leq d)$$

que corresponde ao que é estabelecido no axioma III.

A probabilidade do complemento \bar{I} do evento I definido na equação 2.7.17 é:

$$P\{x > a\} = 1 - P\{x \leq a\}$$

ou:

$$P\{x > a\} = \int_a^{\infty} f(x)dx = 1 - \int_{-\infty}^a f(x)dx$$

Finalmente, a probabilidade do evento $\{X(v) = x_0\}$ pode ser obtida através da probabilidade do evento $\{x_0 - \varepsilon < X(v) \leq x_0 + \varepsilon\}$:

$$P\{x_0 - \varepsilon < X(v) \leq x_0 + \varepsilon\} = \int_{-\infty}^{x_0 + \varepsilon} f(x)dx - \int_{-\infty}^{x_0 - \varepsilon} f(x)dx$$

onde ε é um número estritamente positivo e pequeno, ou:

$$P\{x_0 - \varepsilon < X(v) \leq x_0 + \varepsilon\} = P\{X(v) \leq x_0 + \varepsilon\} - P\{X(v) \leq x_0 - \varepsilon\}$$

Fazendo o limite:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} P\{x_0 - \varepsilon < X(v) \leq x_0 + \varepsilon\} = P\{X(v) \leq x_{0+}\} - P\{X(v) \leq x_{0-}\}$$

A única restrição imposta sobre f é que ela seja absolutamente integrável em $(-\infty, \infty)$. Uma condição suficiente para que ela seja absolutamente integrável é que para qualquer intervalo finito (a, b) , F seja contínua por partes e tenda a zero quando x se torna indefinidamente grande ($x \rightarrow \infty$) ou indefinidamente pequeno ($x \rightarrow -\infty$).

Uma função é contínua por partes em um intervalo (a, b) quando:

- a) ela for contínua nesse intervalo com a exceção de um conjunto finito de n pontos isolados $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$, ou seja, nos subintervalos $(x_{i-1}, x_i) \subset (a, b)$, com $i = 2, 3, \dots, n$, f é contínua
- b) embora a função f não precise nem mesmo ser definida nos pontos $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$, os limites laterais:

$$\lim_{x \rightarrow x_i-} f(x) \quad e \quad \lim_{x \rightarrow x_i+} f(x)$$

têm que ser finitos.

Admitindo que f seja uma função contínua por partes, além de absolutamente integrável, a equação (1.61) fornece:

$$P\{X(v) = x_0\} = 0, \quad x_0 \notin \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$$

$$P\{X(v) = x_0\} = P\{X(v) \leq x_{0+}\} - P\{X(v) \leq x_{0-}\}, \quad x_0 \in \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$$

Nesse último caso, a probabilidade é descontínua em x_0 .

Na forma que o espaço de Borel sobre o eixo dos números reais foi definido, a probabilidade dos eventos $X(v) = x_0$ é igual a zero. É importante lembrar aqui que o fato de um evento ter probabilidade igual a zero não implica, na teoria axiomática das probabilidades, que o evento seja vazio.

2.8 O conceito de variável aleatória

Considere agora o espaço de probabilidade V de um processo aleatório qualquer e um conjunto numérico, por exemplo, o conjunto dos números reais \mathbb{R} . Chama-se de uma variável aleatória X a uma função (ver apêndice deste capítulo) de V em \mathbb{R} , $X : V \rightarrow \mathbb{R}$, ou, $X = X(v)$, onde v é um evento elementar de V .

O significado da variável aleatória é diferente do significado usual dado às funções de uma forma geral. A expressão:

$$X(v) \leq a \quad (2.8.18)$$

não tem o sentido de um intervalo numérico no eixo real. Essa expressão designa o subconjunto de todos os eventos elementares v contidos no espaço de probabilidade, cujo valor da variável aleatória é igual ou inferior ao número real a . A expressão 2.8.18 designa um subconjunto de V . Da mesma forma, a expressão:

$$a \leq X(v) \leq b$$

designa o subconjunto dos eventos elementares de V cujo valor da variável aleatória está contida no intervalo fechado $[a, b]$.

A expressão:

$$X(v) = a$$

representa o subconjunto dos eventos elementares de V cujo valor da variável aleatória é igual a a . Quando I representa um conjunto de números reais, $X(v) \in I$ representa o subconjunto dos eventos elementares correspondentes aos valores da variável aleatória contidos em I .

Para concluir a definição de variável aleatória se impõe:

$$\lim_{a \rightarrow \infty} P\{X(v) = a\} = 0 \quad e \quad \lim_{a \rightarrow -\infty} P\{X(v) = a\} = 0$$

O conjunto numérico utilizado como exemplo para definir uma variável aleatória foi o conjunto dos números reais. Nada impede que o conjunto numérico se limite a um dos conjuntos numéricos que formam o conjunto dos números reais (naturais, inteiros, racionais e irracionais). Por outro lado, uma variável aleatória complexa $Z(v)$ pode ser definida como:

$$Z(v) = X(v) + iY(v)$$

onde X e Y são variáveis aleatórias reais e i é a unidade imaginária. Além disso, nada impede que a variável aleatória tenha um carácter vetorial, ou seja uma variável com n dimensões, cada dimensão sendo uma variável aleatória.

2.9 Função distribuição de probabilidade e função densidade de probabilidade

Define-se probabilidade cumulativa $F(x_0)$ de uma variável aleatória $X(v)$ como sendo:

$$F(x_0) = P\{X(v) \leq x_0\}$$

onde x_0 é um valor fixo do conjunto numérico sobre o qual se define a variável aleatória.

Se a variável aleatória for discreta, a definição de $F(x_0)$ leva a:

$$F(x_0) = \sum_i P\{X_i(v) \leq x_0\}$$

A somatória se estende a n termos, no caso de $\{X_i(v) \leq x_0\}$ ser um conjunto finito, ou ao infinito, no caso de $\{X_i(v) \leq x_0\}$ ser um conjunto infinito, mas enumerável.

No caso de $X(v)$ ser uma variável aleatória contínua, com f definida tal como na seção 2.7:

$$F(x_0) = \int_{-\infty}^{x_0} f(x)dx$$

Quando x_0 é permitido assumir todo e qualquer valor do conjunto numérico sobre o qual a variável aleatória $X(v)$ é definida, a agora função $F(x) = P\{X(v) \leq x\}$ recebe o nome de função distribuição cumulativa ou de função de distribuição de probabilidade. A função f recebe o nome de função densidade de probabilidade e:

$$\frac{dF}{dx} = f(x)$$

nos pontos onde F for derivável.

Propriedades da função distribuição de probabilidade

Considere dois eventos A e B , sendo que B está contido em A . Se $B \subset A$, então:

$$\begin{aligned} A &= B \cup (A - B) \\ &\quad \text{e} \\ B \cap (A - B) &= \emptyset \end{aligned}$$

Usando a equação 2.2.3 tem-se que:

$$P(A) = P(B \cup (A - B)) = P(B) + P(A - B) \geq P(B)$$

já que $P(A - B)$ está contida no intervalo real $[0,1]$.

Considere agora que x_1 e x_2 são dois números reais, tais que $x_1 \leq x_2$. A relação entre os eventos $\{X(v) \leq x_1\}$ e $\{X(v) \leq x_2\}$ é que $\{X(v) \leq x_1\} \subset \{X(v) \leq x_2\}$ e, em consequência, $P\{X(v) \leq x_1\} \leq P\{X(v) \leq x_2\}$. Da definição de função distribuição cumulativa, $F(x_1) \leq F(x_2)$, ou seja, $F(x)$ é uma função não decrescente de x .

No caso de uma variável aleatória contínua, decorre da definição de probabilidade em um espaço não enumerável e da função distribuição cumulativa que:

$$F(-\infty) = 0 \quad \text{e} \quad F(\infty) = 1$$

No caso de um espaço finito ou de um espaço infinito, mas enumerável o mesmo resultado é obtido de forma análoga.

Considere o caso de um espaço infinito mas enumerável. Nesse caso:

$$\sum_{i=1}^{\infty} P\{X_i(v)\} = 1$$

Como X_i é um número real $-\infty < X_i < \infty$. O conjunto $\{X_i\}$ está contido em $(-\infty, \infty)$ e $X_i \leq x_0$ para qualquer x_0 finito, está contido em $\{X_i\}$. Isso significa que:

$$\lim_{x_0 \rightarrow \infty} \{X_i \leq x_0\} = \{X_i\}$$

$$\lim_{x_0 \rightarrow -\infty} \{X_i \leq x_0\} = \emptyset$$

Desse resultado e da definição de probabilidade cumulativa tem-se que $F(-\infty) = 0$ e $F(\infty) = 1$ para o caso de uma variável infinita, mas enumerável. No caso de uma variável aleatória finita, a conclusão é imediata.

Decorrem da definição de densidade de probabilidade cumulativa e do que foi discutido na seção 2.7:

1. Se $F(x_0) = 0$, então $F(x) = 0$ para qualquer $x \leq x_0$
2. A função $F(x)$ é contínua pela direita $F(x_+) = F(x)$
3. $P\{x_0 < X(v) \leq x_1\} = F(x_1) - F(x_0)$
4. Como $\{x_0 < X(v) \leq x_1\}$ e $\{X(v) = x_0\}$ são mutuamente exclusivos e $\{x_0 \leq X(v) \leq x_1\} = \{x_0 < X(v) \leq x_1\} \cup \{X(v) = x_0\}$, então $P\{x_0 \leq X(v) \leq x_1\} = F(x_1) - F(x_{0-})$

2.9.1 Distribuição de probabilidade condicional

Lembrando que, dados dois eventos A e B de um espaço de probabilidade V a probabilidade de que o evento A ocorra, uma vez que o evento B ocorreu (probabilidade condicional) é dada pela equação 2.3.10, a distribuição cumulativa probabilidade de uma variável aleatória $X(v)$ dada que um evento B do espaço de probabilidade ocorreu $F(x | B)$ é definida como:

$$F(x | B) = \frac{P(\{X(v) \leq x\} \cap B)}{P(B)}$$

Uma vez que quando o evento B está contido no evento A a probabilidade condicional $P(A | B)$ é igual a 1 a função de distribuição cumulativa $F(x | B)$ tende a 1, quando x tende ao infinito, porque, nesse caso, qualquer evento B do espaço de Borel definido sobre o eixo real está contido em $\{X(v) < \infty\}$. Por outro lado, como $X(v) \leq x$ é o conjunto vazio, quando x tende a menos infinito, $F(x | B)$ tende a zero, quando x tende a menos infinito.

A função densidade de probabilidade condicional $f(x | B)$ é definida como:

$$f(x | B) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{P\{x < X(v) \leq x + \Delta x | B\}}{\Delta x}$$

e:

$$F(\infty | B) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x | B) dx = 1$$

Teorema da probabilidade total e teorema de Bayes

Neste último item, serão enunciados, sem demonstração, os teoremas da probabilidade total e o teorema de Bayes. A demonstração desses teoremas pode ser encontrada, por exemplo, em [23].

Define-se uma partição de um conjunto V como sendo uma coleção de subconjuntos, ou um conjunto de subconjuntos $\{A_1, A_2, \dots, A_n\}$, mutuamente exclusivos, $A_i \cap A_j = \emptyset$, com $i \neq j$, de V , tais que:

$$A_1 \cup A_2 \cup \dots \cup A_n = V$$

Da definição de probabilidade condicional entre dois eventos A e B tem-se que:

$$P(A | B) = \frac{P(B | A)P(A)}{P(B)}$$

No caso de uma variável aleatória contínua, se $A = \{x_0 < X(v) \leq x_1\}$ e B for um evento qualquer do campo de Borel definido sobre o eixo dos números reais:

$$P(B | \{x_0 < X(v) \leq x_1\}) = \frac{P(\{x_0 < X(v) \leq x_1 | B\})P(B)}{P(\{x_0 < X(v) \leq x_1\})}$$

ou:

$$P(B | \{x_0 < X(v) \leq x_1\}) = \frac{F(x_1 | B) - F(x_0 | B)}{F(x_1) - F(x_0)}P(B)$$

O caso particular onde $\{X(v) = x_0\}$, $P(B | \{X(v) = x_0\})$ é definido como:

$$P(B | \{X(v) = x_0\}) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} P(B | \{x_0 < X(v) \leq x_0 + \Delta x\})$$

ou:

$$P(B | \{X(v) = x_0\}) = \frac{f(x_0 | B)}{f(x_0)}P(B)$$

Teorema 2.1 (Teorema da probabilidade total). *Se $\{A_1, A_2, \dots, A_n\}$ é uma partição de um espaço de probabilidade V e B é um evento arbitrário de V , então:*

$$P(B) = P(B | A_1)P(A_1) + P(B | A_2)P(A_2) + \dots + P(B | A_n)P(A_n) \quad (2.9.19)$$

Teorema 2.2 (Teorema de Bayes). *Se $\{A_1, A_2, \dots, A_n\}$ é uma partição de um espaço de probabilidade V e B é um evento arbitrário de V , então:*

$$P(A_i | B) = \frac{P(B | A_i)P(A_i)}{P(B | A_1)P(A_1) + P(B | A_2)P(A_2) + \dots + P(B | A_n)P(A_n)} \quad (2.9.20)$$

Teorema 2.3 (Teorema da probabilidade total no caso de uma variável aleatória contínua).

$$P(B) = \int_{-\infty}^{\infty} P(B | \{X(v) = x\})f(x)dx \quad (2.9.21)$$

Teorema 2.4 (Teorema de Bayes no caso de uma variável aleatória contínua).

$$f(x | B) = \frac{P(B | \{X(v) = x\})f(x)}{P(B)} = \frac{P(B | \{X(v) = x\})f(x)}{\int_{-\infty}^{\infty} P(B | \{X(v) = x\})f(x)dx} \quad (2.9.22)$$

2.10 Exercícios

Observação. A solução dos exercícios a seguir requer alguma familiaridade com a álgebra dos conjuntos (ver, por exemplo, [12]; [2]). Para uma visão mais atual e axiomática da teoria dos conjuntos ver [6].

1. Se A e B são partes de um conjunto E , então $A \subset E$ e $B \subset E$. O conjunto complementar de A em relação a E , que pode ser representado como $C_E(A)$, é definido como sendo o conjunto formado pelos elementos de E que não pertencem a A . Quando o conjunto E é igual ao conjunto universo V , $C_V(A) = \bar{A}$ onde \bar{A} recebe o nome de complementar de A . Com base nessas definições, demonstre as leis de **de Morgan**:

- (a) o complementar da intersecção é o igual à união dos complementares

$$C_E(A \cap B) = C_E(A) \cup C_E(B)$$

- (b) o complementar da união é igual à intersecção dos complementares

$$C_E(A \cup B) = C_E(A) \cap C_E(B)$$

- (c) escreva as expressões equivalentes para o caso particular em que E é igual ao conjunto universo V .

2. Ilustre, através de dois ou três exemplos, a seguinte consequência das leis de **de Morgan**. Considere uma identidade entre conjuntos expressa em termos das operações de união e intersecção entre conjuntos e passagem ao complementar. Se todos os conjuntos forem substituídos por seus complementos, as operações de união e intersecção forem substituídas, respectivamente, pelas operações de intersecção e de união, a identidade é preservada.

3. Demonstre que, se A e B são partes de um conjunto E então:

$$\begin{aligned} A \subset B &\Leftrightarrow C_E(B) \subset C_E(A) \\ C_E(A) \subset B &\Leftrightarrow C_E(B) \subset A \\ A \subset C_E(B) &\Leftrightarrow B \subset C_E(A) \\ B = C_E(A) &\Leftrightarrow A = C_E(B) \end{aligned}$$

4. Os exercícios 1, 2 e 3 ilustram o fato da álgebra dos conjuntos possuir um **princípio de dualidade**. Enuncie esse princípio.
5. Demonstre a equação 2.4.11.
6. Considere um conjunto formado por n elementos. Mostre que o número total de subconjuntos que podem ser formados é igual a 2^n .
7. Mostre a probabilidade definida pela frequência é compatível com a definição axiomática de probabilidade.
8. Mostre que se $A \cap B = \emptyset$, então $P(A) \leq P(\bar{B})$.
9. Em que condição dois eventos A e B , mutuamente exclusivos, ou seja $A \cap B = \emptyset$, podem também ser eventos independentes?
10. Dados quatro eventos A , B , C e D de um mesmo espaço de probabilidade, mostre que:

$$P(A \cap B \cap C \cap D) = P(A \mid B \cap C \cap D) \times P(B \mid C \cap D) \times P(C \mid D) \times P(D)$$

Generalize esse resultado para obter a assim chamada regra da cadeia. Dado um conjunto de eventos $\{A_i\}$, com $i = 1, 2, 3, \dots, n$:

$$\begin{aligned} P(A_1 \cap A_2 \cap \dots \cap A_{n-1} \cap A_n) &= P(A_1 \mid (A_2 \cap \dots \cap A_{n-1} \cap A_n)) \times \\ &P(A_2 \mid (A_3 \cap \dots \cap A_{n-1} \cap A_n)) \times \dots \\ &\times P(A_{n-2} \mid (A_{n-1} \cap A_n)) \times P(A_{n-1} \mid A_n) \times P(A_n) \end{aligned}$$

2.11 Apêndice: O conceito de função

Considere dois conjuntos quaisquer F e G . Define-se como uma função f de F em G , de forma simbólica:

$$f : F \rightarrow G$$

como sendo toda regra que a cada um dos elementos de F , sem exceção, associa um único elemento de G . É importante notar que em uma função cada um dos elementos do conjunto F , chamado de domínio de f , está ligado a um único elemento de G , chamado de contradomínio de f . O elemento de G ligado a um elemento de F é chamado de imagem de F e o conjunto de todos os elementos de G que são imagem dos elementos de F é chamado de conjunto imagem de f , $Im(f)$. A definição não exige que todos os elementos de G sejam imagem de um elemento de F . O conjunto G pode conter elementos que não sejam imagem de um elemento de F . Por outro lado, um elemento de G pode ser imagem de dois ou mais elementos de F .

Casos especiais:

- I. uma função $f : F \rightarrow G$ é chamada de função injetora, quando cada elemento do conjunto $Im(f)$ é a imagem de um único elemento de F .
- II. Uma função $f : F \rightarrow G$ é chamada de função sobrejetora, quando o conjunto imagem coincide com o contradomínio G .
- III. uma função $f : F \rightarrow G$ é chamada de uma função bijetora, quando ela for, ao mesmo tempo, injetora e sobrejetora. Nas funções bijetoras, a cada um dos elementos de F é associado a um único elemento de G e cada elemento de G , sem exceção, é imagem de um único elemento de F . A uma função bijetora, e só para funções bijetoras, se pode definir uma função inversa f^{-1} , $f^{-1} : G \rightarrow F$.

Considere agora três conjuntos F , G e H e duas funções $f : F \rightarrow G$ e $g : F \rightarrow H$ e considere que $Im(f)$ está contida no conjunto G ($Im(f) \subset G$). Chama-se de composição da função f com a função g :

$$(g \circ f) : F \rightarrow H$$

à associação de cada elemento da $Im(f)$ a um único elemento de H .

Como cada elemento de F , sem exceção, está associado, através de f a um elemento de G que pertence à $Im(f)$, e cada elemento de G , sem exceção, está associado, através de g a um único elemento de H que pertence à $Im(g)$, cada elemento de F , sem exceção, está associado, através de $g \circ f$ a um único elemento

de H pertencente à imagem de $Im(g \circ f)$. Portanto, $g \circ f$ é uma função de F em H .

A composição de funções não é uma operação comutativa. De uma forma geral, a existência de $g \circ f$ não implica, nem mesmo, na existência de $f \circ g$. A composição de funções é associativa. A composição de funções sobrejetoras é uma função sobrejetora, o mesmo acontecendo com a associação de funções injetoras e bijetoras. No caso particular das funções bijetoras a associação da uma função $f : F \rightarrow G$ com a sua função inversa $f^{-1} : G \rightarrow F$ é a função identidade $I : F \rightarrow F$, que associa cada elemento F a ele mesmo.

Capítulo 3

Funções de variáveis aleatórias

3.1 Funções de uma variável aleatória

Se $X(v)$ é uma variável aleatória associada a um elemento do espaço de probabilidade V :

$$X : V \rightarrow \mathbb{R}$$

\mathbb{R} sendo a reta real e $g(x)$ é uma função de uma variável real x , contínua por partes, a variável:

$$Y(v) = g(X(v))$$

é uma nova variável aleatória associada a v formada pela composição das funções g e X . Para que a variável Y possa ser definida, a imagem de X tem que estar contida no domínio de g (ver figura 3.1) .

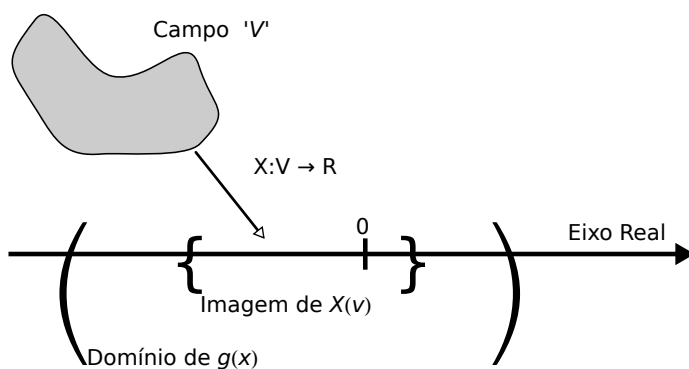


Figura 3.1: Relação entre a imagem de $X(v)$ e o domínio de $g(x)$.

3.1.1 A função distribuição de probabilidade da variável aleatória $Y(v) = g(X(v))$

O evento $Y(v) \leq y_0$ é um subconjunto de V formado pelos elementos v para os quais a variável aleatória Y é inferior ao número real y_0 . A função distribuição de probabilidade $F_Y(y_0)$ é definida como:

$$F_Y(y_0) = P\{Y(v) \leq y_0\} \quad (3.1.1)$$

onde:

$$y = Y(v) \leq y_0$$

corresponde a um segmento semi-infinito no eixo ordenado y dos números reais. Da equação 3.1.1 tem-se que:

$$F_Y(y_0) = P\{g(X(v)) \leq y_0\}$$

o que implica na imposição de que:

$$g(x) \leq y_0 \quad (3.1.2)$$

A solução da inequação 3.1.2 é um subconjunto R_y do eixo ordenando x dos números reais e a distribuição de probabilidade $F_Y(y_0)$ pode ser escrita como:

$$F_Y(y_0) = P\{x \in R_y\} \quad (3.1.3)$$

Isso significa que o subconjunto R_y do eixo ordenado x , que corresponde ao semieixo $y \leq y_0$, deve ser composto por uniões e/ou intersecções de um conjunto enumerável de intervalos semi-infinitos $x \leq x_i$ no eixo ordenado x (figura 3.2). Além disso, como a função $g(x)$ deve representar uma variável aleatória associada a um evento v do espaço de probabilidade V , é necessário que ela satisfaça a condição:

$$P\{g(x) \rightarrow \infty\} = 0 \quad e \quad P\{g(x) \rightarrow -\infty\} = 0$$

A função distribuição de probabilidade $F_Y(y)$ de uma variável aleatória Y definida por 3.1.3 pode ser expressa em função da distribuição de probabilidade $F_X(x)$ da variável aleatória X e de $g(x)$. Para isso é necessário encontrar o subconjunto R_y do eixo real e encontrar a probabilidade de $x = X(v)$ esteja nesse subconjunto.

Exemplo 3.1. ¹ *Expresse $F_Y(y)$ em termos de $F_X(x)$ para $Y = aX + b$.
A função $F_Y(y)$ é definida como:*

$$F_Y(y) = P\{Y(v) \leq y\}$$

Usando a relação $y = ax + b$ para expressar x em relação a y :

$$x = \frac{y - b}{a}$$

Se $a > 0$:

$$P(Y(v) \leq y) = P\{X(v) \leq x\} = P\{X(v) \leq \frac{y - b}{a}\}$$

¹Os exemplos 3.1 e 3.2 foram extraídos de [23]

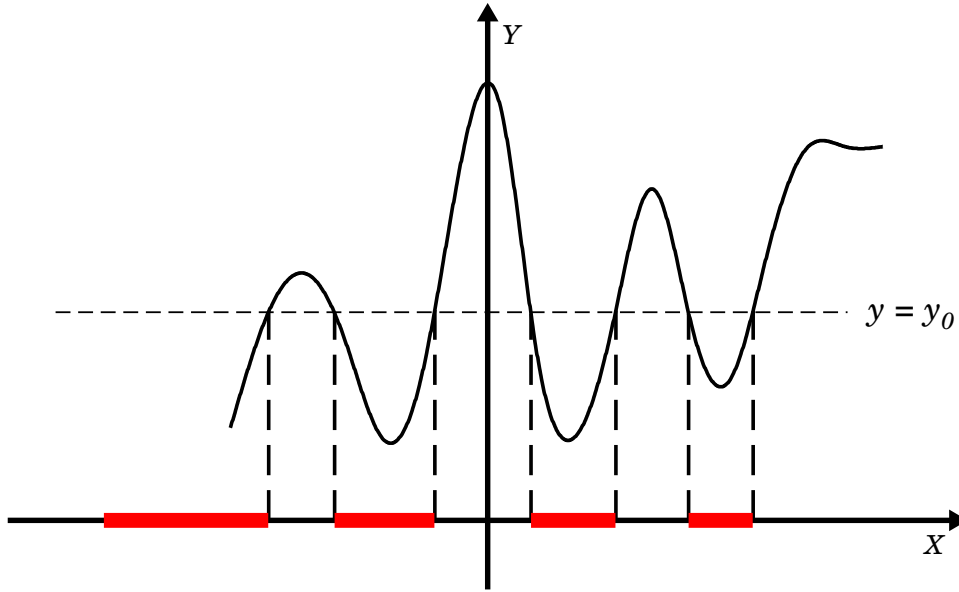


Figura 3.2: Composição do subconjunto R_y , que corresponde à solução de $g(x) \leq y_0$

ou seja:

$$F_Y(y) = P\left\{X(v) \leq \frac{y-b}{a}\right\} = F_X\left(\frac{y-b}{a}\right)$$

Por outro lado, se $a < 0$:

$$P\{Y(v) \leq y\} = P\{X(v) \geq x\} = P\{X(v) \geq \frac{y-b}{a}\} = 1 - F_X\left(\frac{y-b}{a}\right)$$

Exemplo 3.2. Um exemplo importante

Considere que a função $g(x)$ seja definida como:

$$g(x) = \begin{cases} x + c & \text{para } x \leq -c \\ 0 & \text{para } -c < x \leq c \\ x - c & \text{para } x > c \end{cases}$$

ou seja, g é constante e igual a zero no intervalo $[-c, c]$. Isso significa que, para y menor do que zero:

$$P\{Y(v) \leq y\} = P\{X(v) \leq y - c\} = F_X(y - c)$$

e, para y maior do que zero:

$$P\{Y(v) \leq y\} = P\{X(v) \leq y + c\} = F_X(y + c)$$

A função distribuição de probabilidade $F_Y(y) = P\{Y(v) \leq y\}$ tem uma descontinuidade em y igual a zero:

$$P\{Y(v) \leq y, \text{ com } y \rightarrow 0_-\} = F_X(-c)$$

$$\stackrel{e}{P\{Y(v) \leq y, \text{ com } y \rightarrow 0_+\}} = F_X(c)$$

com uma magnitude de:

$$\Delta_{y=0} = F_X(c) - F_X(-c)$$

O mesmo resultado seria formalmente obtido calculando-se:

$$P\{Y(v) = 0\} = P\{-c < X(v) \leq c\} = F_X(c) - F_X(-c)$$

É importante recordar aqui que $Y(v) = 0$ não tem o significado de um intervalo numérico. $P\{Y(v) = 0\}$ significa a probabilidade do evento v cujo valor da variável aleatória $Y(v)$ é zero.

Esse resultado pode ser facilmente generalizado para o caso em que $g(x)$ é constante em um intervalo $(x_0, x_1]$.

3.1.2 Relação entre as densidades de probabilidade de $X(v)$ e de $Y(v) = g(X(v))$

A função densidade de probabilidade f_Y é definida por:

$$F_Y(y) = \int_{-\infty}^y f_Y(\eta) d\eta \quad \text{ou} \quad f_Y(y) = \frac{dF_Y}{dy}$$

Se $Y(v) = g(X(v))$, a pergunta que pode ser feita é qual é a relação entre f_Y e f_X , que tem uma expressão análoga a f_Y .

A forma mais direta é obter F_Y como descrito na seção 3.1 e derivar o resultado em relação a y . No entanto, quando a função $g(x)$ não é monotônica, surgem dificuldades para se obter f_Y diretamente.

Dependendo da função g , a equação real:

$$y_0 = g(x) \tag{3.1.4}$$

pode não ter solução alguma como pode ter uma, várias soluções ou um conjunto infinito, mas enumerável, de soluções. Mais especificamente, a pergunta que deve ser feita é se a equação 3.1.4 tem solução em R_y . Se não houver solução nesse conjunto, o conjunto $X(v)$ que satisfaz (3.16) é vazio e f_Y é nula. Se $\{x_i, i = 1, 2, 3, \dots, n, \dots\}$ for o conjunto de soluções da equação 3.1.4, e admitindo que g seja contínua em uma vizinhança² de cada uma das raízes, quando y está contido no intervalo $(y_0 - \Delta y/2 < y < y_0 + \Delta y/2)$, com Δy estritamente positivo, x está contido na união dos intervalos:

$$x_i - \frac{\Delta x_i}{2} < x < x_i + \frac{\Delta x_i}{2} \tag{3.1.5}$$

com Δx_i estritamente positivo. Como o conjunto de raízes é um conjunto enumerável, sempre é possível definir um Δy de forma que os Δx_i correspondentes sejam suficientemente pequenos para que os intervalos definidos em 3.1.5 não tenham intersecção.

A probabilidade:

$$P\left(\left\{y_0 - \frac{\Delta y}{2} < Y(v) < y_0 + \frac{\Delta y}{2}\right\}\right) = \int_{y_0 - \Delta y/2}^{y_0 + \Delta y/2} f_Y(\eta) d\eta = f_Y(\bar{y}) \Delta y$$

²Vizinhança de um ponto x_i da reta real é qualquer intervalo centrado em x_i . A expressão $|x - x_i| < \varepsilon$, com ε sendo um número estritamente positivo, define uma vizinhança de x_i . Note que a definição independe da magnitude de ε , que pode ser tão pequeno quanto se queira.

onde $\left(y_0 - \frac{\Delta y}{2} < \bar{y} < y_0 + \frac{\Delta y}{2}\right)$.

Da mesma forma, a probabilidade:

$$P\left(\left\{x_i - \frac{\Delta x_i}{2} < X(v) < x_i + \frac{\Delta x_i}{2}\right\}\right) = \int_{x_i - \Delta x_i/2}^{x_i + \Delta x_i/2} f_X(\xi) d\xi = f_X(\bar{x}_i) \Delta x_i$$

onde:

$$x_i - \frac{\Delta x_i}{2} < \bar{x}_i < x_i + \frac{\Delta x_i}{2}$$

Como os conjuntos $\left\{x_i - \frac{\Delta x_i}{2} < \bar{x}_i < x_i + \frac{\Delta x_i}{2}\right\}$ são disjuntos:

$$P\left(\left\{y_0 - \frac{\Delta y}{2} < Y(v) < y_0 + \frac{\Delta y}{2}\right\}\right) = \sum_i P\left(\left\{x_i - \frac{\Delta x_i}{2} < \bar{x}_i < x_i + \frac{\Delta x_i}{2}\right\}\right)$$

ou:

$$f_Y(\bar{y}) \Delta y = \sum_i f_X(\bar{x}_i) \Delta x_i \quad (3.1.6)$$

Lembrando da equação 3.1.4, para um Δy estritamente positivo o conjunto Δx_i estritamente positivo fica fixado em:

$$\Delta y = \left| \left(\frac{dg}{dx} \right)_{x_i} \right| \Delta x_i$$

a equação 3.1.6 passa a ser escrita como:

$$f_Y(\bar{y}) \Delta y = \sum_i f_X(\bar{x}_i) \frac{\Delta y}{\left| \left(\frac{dg}{dx} \right)_{x_i} \right|}$$

ou:

$$f_Y(\bar{y}) = \sum_i \frac{f_X(\bar{x}_i)}{\left| \left(\frac{dg}{dx} \right)_{x_i} \right|}$$

No limite em que Δy tende a zero, todos os Δx_i tendem a zero, assim como \bar{y} tende a y_0 e todos \bar{x}_i tendem a x_i e, de uma forma geral, tem-se:

$$f_Y(y) = \sum_i \frac{f_X(x_i)}{\left| \left(\frac{dg}{dx} \right)_{x_i} \right|}$$

onde $\{x_i\}$ são as soluções de $y = g(x)$ com y fixo.

O problema inverso

Considere uma variável aleatória $X(v)$, uma função de uma variável real g e uma segunda variável aleatória $Y(v) = g(X(v))$. As funções distribuição de probabilidade F_x e F_y são definidas como $F_X(x) = P\{X(v) \leq x\}$ e $F_Y(y) = P\{Y(v) \leq y\}$ e são contínuas pela direita e não decrescentes. Se a função g for monotônica crescente e dotada de função inversa, o conjunto R_y é o conjunto numérico sobre no qual a variável aleatória $X(v)$ é definida e:

$$F_Y(y) = F_Y(g(x)) = P\{X(v) \leq x\} = F_X(x)$$

com $F_Y(y) = F_X(x)$ com **probabilidade 1**³. Isso significa que, se a função $F_Y(y)$ ⁴ tiver inversa vale a afirmação:

$$\text{se } y = F_Y^{-1}(F_X(x)) \text{ então } P\{Y(v) \leq y\}$$

ou seja, se $F_X(x)$ e $F_Y(y)$ são conhecidas, a função $g(x)$ que transforma a variável aleatória $X(v)$ na variável aleatória $Y(v)$ com função de distribuição cumulativa igual a $F_Y(y)$ é igual a composição $g(x) = (F_Y^{-1} \circ F_X)(x)$.

Exemplo 3.3. Um primeiro exemplo discutido.

Considere duas funções de densidade cumulativa:

$$F_X(x) = \frac{1}{2} + \frac{x}{2} \quad \text{com} \quad -1 \leq x \leq 1$$

e:

$$F_Y = \sqrt{y} \quad \text{com} \quad 0 \leq y \leq 1$$

A função real $u = F_Y(y) : \{0 \leq y \leq 1\} \rightarrow \{0 \leq u \leq 1\}$ é contínua e estritamente crescente e, por isso, possui função inversa $F_Y^{-1}(u) = u^2$.

A função $g(x)$ que transforma uma variável aleatória $X(v)$ com a distribuição cumulativa F_x na variável $Y(v)$ com a distribuição F_Y é:

$$y = g(x) = F_Y^{-1}(F_X(x)) = \left(\frac{1}{2} + \frac{x}{2}\right)^2$$

Exemplo 3.4. Um segundo exemplo discutido.

Considere agora as funções de probabilidade cumulativa:

$$F_X(x) = \frac{1}{2} + \frac{x}{2} \quad \text{com} \quad -1 \leq x \leq 1$$

e:

$$F_Y(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^y \exp\left(-\frac{\eta^2}{2}\right) d\eta \quad -\infty \leq y \leq \infty$$

A função real $z = F_Y(y) : \{-\infty \leq y \leq \infty\} \rightarrow \{0 < z < 1\}$ é contínua, bijetora e estritamente crescente e, por isso, possui função inversa $F_Y^{-1}(z)$. A contrário do exemplo 1, no entanto, essa função não tem expressão analítica, mas os seus valores são determinados da solução da equação transcendente $z = F_Y(y)$. De qualquer forma, a função $g(x)$ que transforma a variável aleatória $X(v)$, com função de distribuição cumulativa F_X na variável aleatória $Y(v)$, com distribuição cumulativa F_Y é $y = g(x) = F_Y^{-1}(F_X(x))$.

³Reveja o conceito de **probabilidade 1** no capítulo 2

⁴Está se referindo aqui à função real $F_y(y)$ da variável real y .

A figura 3.3 ilustra a solução gráfica dada ao problema de se encontrar $y = g(x)$. Uma variável z , definida na forma $z = F_X$, e uma variável w é definida na forma $w = F_Y$. Como as imagens de F_X e de F_Y correspondem ao mesmo intervalo $[0, 1]$, a variável w é feita igual a z e, o valor de y é determinado, formando o par ordenado (x, y) , que forma a função $y = g(x) = F_Y^{-1}(F_X(x))$.

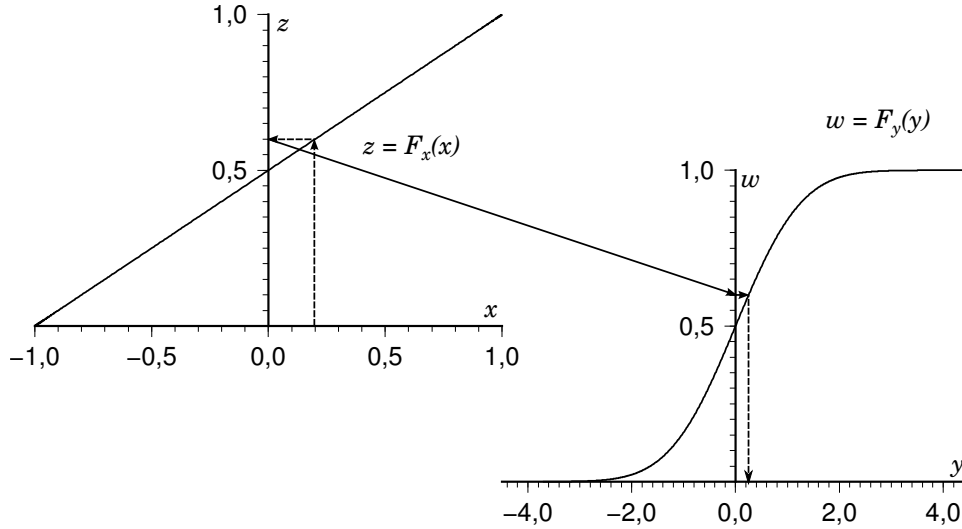


Figura 3.3: Solução gráfica do problema inverso

A figura 3.4 apresenta a função $y = g(x)$ obtida graficamente a partir de $F_X(x)$ e $F_Y(y)$.

3.1.3 Esperança matemática, variância, momentos de ordem superior

Define-se esperança matemática, ou média, de uma variável aleatória contínua $X(v)$ que tenha uma densidade de probabilidade f_X como:

$$E(X(v)) = \int_{-\infty}^{\infty} x f_X(x) dx \quad (3.1.7)$$

Da definição de valor esperado, a integral imprópria contida na equação 3.1.7 tem que existir e a existência de:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} |x f_X(x)| dx$$

é condição suficiente para isso.

No caso de uma distribuição discreta onde a variável $X(v)$ pode assumir valores x_i com probabilidade p_i a esperança matemática é definida como:

$$E(X(v)) = \sum_i x_i p_i \quad \text{com} \quad p_i = P\{X(v) = x_i\}$$

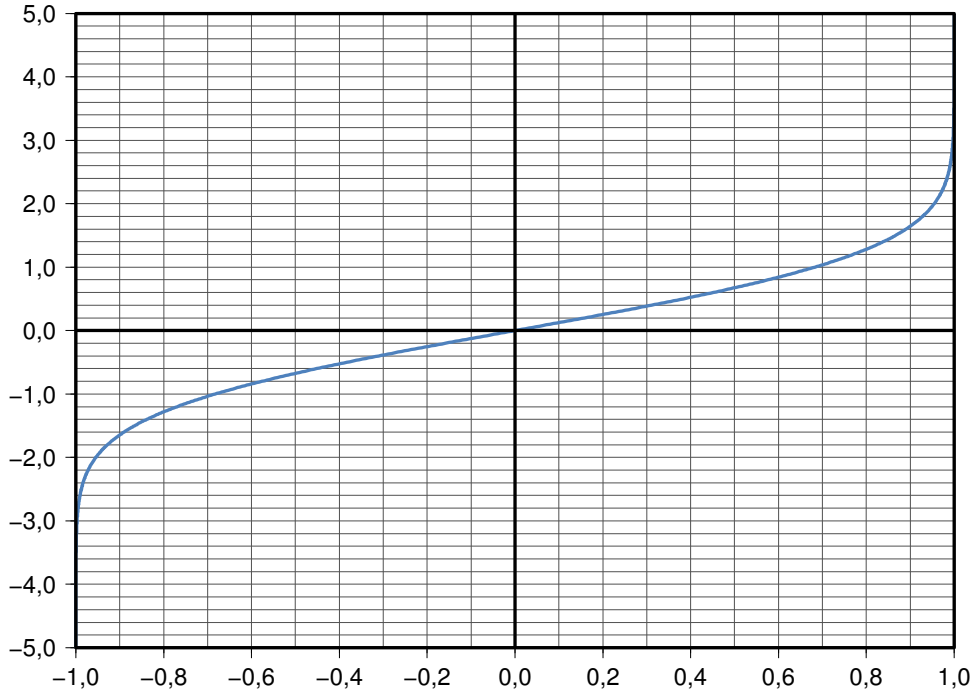


Figura 3.4: Solução do problema inverso. Função $y = g(x)$ calculada graficamente a partir das funções $F_X(x)$ e $F_Y(y)$ fornecidas no segundo exemplo discutido.

3.1.4 Média condicional

Lembrando que a probabilidade condicional de um evento A , assumindo que o evento B tenha ocorrido, é definida como:

$$P(A | B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)}$$

e que a distribuição de probabilidade é definida como:

$$F(X(v) | B) = P\{X(v) \leq x | B\} = \frac{P\{X(v) \leq x\} \cap B}{P(B)}$$

e a densidade de probabilidade é definida como:

$$f_X(x | B) = \frac{dF(X(v) | B)}{dx}$$

a esperança matemática condicional é definida como:

$$E(X(v) | B) = \int_{-\infty}^{\infty} x f_X(x | B) dx$$

No caso de uma variável discreta:

$$E(X(v) | B) = \sum_i x_i P\{X(v) = x_i | B\}$$

Exemplo 3.5. Um exemplo muito simples

O valor médio de uma variável aleatória $X(v)$ considerando que $B = \{X(v) \geq a\}$ é:

$$E(X(v) \mid \{X(v) \geq a\}) = \frac{\int_a^\infty x f_X(x) dx}{\int_a^\infty f_X(x) dx}$$

3.1.5 A esperança matemática de $Y(v) = g(X(v))$

Considere uma variável aleatória contínua $X(v)$ com uma densidade de probabilidade f_X , uma função real de variável real $g(x)$ e uma segunda variável aleatória $Y(v)$ definida em função de $X(v)$ na forma:

$$Y(v) = g(X(v))$$

A esperança matemática da variável $Y(v)$ é dada por:

$$E(Y(v)) = \int_{-\infty}^{\infty} y f_Y(y) dy = \lim_{a \rightarrow -\infty} \int_{-a}^a y f_Y(y) dy$$

A integral própria no intervalo $(-a, a)$ pode ser escrita como uma soma integral na forma:

$$\int_{-a}^a y f_Y(y) dy = \lim_{\text{máximo de } \Delta y_i \rightarrow 0} \sum_{i=1}^I \bar{y}_i f_Y(\bar{y}_i) \Delta y_i$$

onde Δy_i são uma partição arbitrária do intervalo $(-a, a)$ em I subintervalos definidos por $I + 1$ pontos $-a = y_0 < y_1 < y_2 < \dots < y_I = a$ e \bar{y}_i está contido no intervalo $y_i < \bar{y}_i < y_i + \Delta y_i = y_{i+1}$.

Cada intervalo Δy_i é relacionado, em princípio, a um conjunto finito de intervalos Δx_{i_k} através da função $g(x)$ (figura 3.5) Existem muito poucas restrições impostas sobre $g(x)$ (figura 3.1). Para um Δy_i suficientemente pequeno o conjunto $\{\Delta x_{i_k}\}$ é um conjunto disjunto. Isso significa que a diferencial $f_Y(\bar{y}_i) \Delta y_i$ no eixo y é aproximadamente igual a uma soma de diferenciais no eixo real x na forma:

$$f_Y(\bar{y}_i) \Delta y_i \approx f_X(\bar{x}_{i_1}) \Delta x_{i_1} + f_X(\bar{x}_{i_2}) \Delta x_{i_2} + \dots + f_X(\bar{x}_{i_k}) \Delta x_{i_k} \quad (3.1.8)$$

onde $\{\bar{x}_{i_k}\}$ é o conjunto solução de $\bar{y}_i = g(x)$, uma vez que:

$$f_Y(\bar{y}_i) \Delta y_i \approx P\{y_i < Y(v) \leq y_i + \Delta y_i\} = \sum_k P\{x_{i_k} < X(v) \leq x_{i_{k+1}}\}$$

Multiplicando o primeiro membro da equação 3.1.8 por \bar{y}_i e o segundo membro pela sua representação em função de g tem-se:

$$\bar{y}_i f_Y(\bar{y}_i) \Delta y_i \approx g(\bar{x}_{i_1}) f_X(\bar{x}_{i_1}) \Delta x_{i_1} + g(\bar{x}_{i_2}) f_X(\bar{x}_{i_2}) \Delta x_{i_2} + \dots + g(\bar{x}_{i_k}) f_X(\bar{x}_{i_k}) \Delta x_{i_k}$$

Definindo um novo conjunto como a união dos conjuntos $\{\bar{x}_{i_k}\}$ para todos os valores de i e de k :

$$\{\bar{x}_j\} = \cup_{i,k} \{\bar{x}_{i_k}\}$$

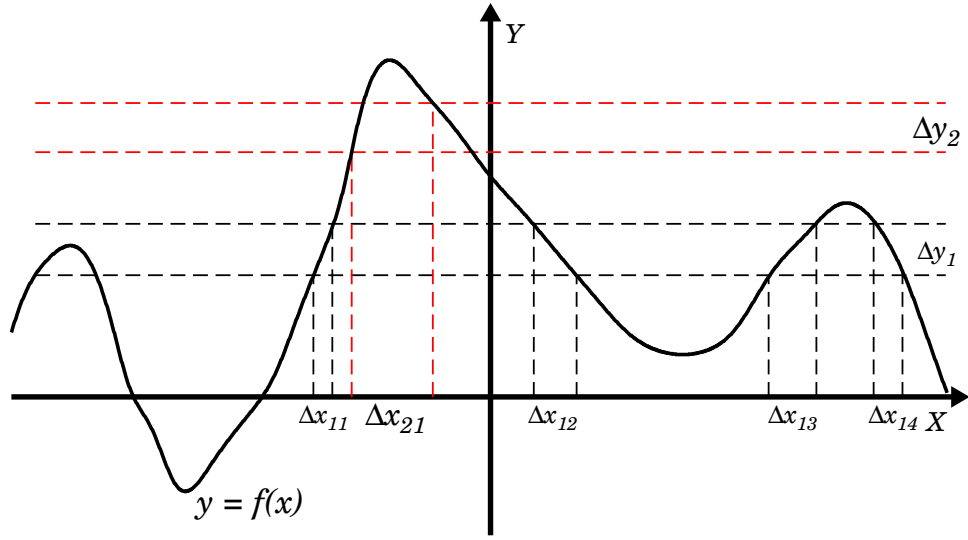


Figura 3.5: A relação entre o intervalo Δy no eixo y e os intervalos correspondentes Δx_i no eixo x .

com os elementos ordenados de forma crescente, tem-se:

$$\sum_{i=1}^I \bar{y}_i f_Y(\bar{y}_i) \Delta y_i \approx \sum_{j=1}^J g(\bar{x}_j) f_X(\bar{x}_j) \Delta x_j$$

onde J é o número total de elementos do conjunto $\{x_j\}$. Como os intervalos Δy_i são feitos suficientemente pequenos para que Δx_j sejam disjuntos, no limite em que máximo de Δy_i tende a zero:

$$\int_{-a}^a y f_Y(y) dy = \lim_{\text{máximo de } \Delta x_j \rightarrow 0} \left(\sum_{j=1}^J g(\bar{x}_j) f_X(\bar{x}_j) \Delta x_j \right)$$

Se y é feito variar continuamente sobre todo o intervalo $-\infty < y < \infty$, x é feito variar sobre todo o intervalo $-\infty < x < \infty$ e:

$$\int_{-\infty}^{\infty} y f_Y(y) dy = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) f_X(x) dx$$

ou seja:

$$E(Y(v)) = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) f_X(x) dx = E(g(x))$$

a esperança matemática de $Y(v)$ é igual à esperança matemática de $g(X(v))$.

3.1.6 Variância e momentos de ordem superior

Define-se variância de uma variável aleatória como:

$$\sigma^2(X(v)) = E(X(v) - E(X(v)))^2$$

No caso de uma variável aleatória contínua:

$$\sigma^2(X(v)) = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \eta)^2 f_X(x) dx$$

onde $\eta = E(X(v))$. No caso de uma variável discreta:

$$\sigma^2 = \sum_{i=1}^n p_i (x_i - \eta)^2 \quad p_i = P\{X(v) = x_i\}$$

Não é difícil mostrar que:

$$\sigma^2(X(v)) = E((X(v))^2) - (E(X(v)))^2$$

Define-se momento de ordem n e momento central de ordem n como:

$$m_n = E((x(v))^n) = \int_{-\infty}^{\infty} x^n f_X(x) dx$$

e

$$\mu_n = E((x(v) - \eta)^n) = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \eta)^n f_X(x) dx$$

Momento absoluto de ordem n e momento central absoluto de ordem n são definidos, respectivamente como $E(|X(v)|^n)$ e $E(|X(v) - \eta|^n)$. Momento generalizado e momento absoluto generalizado são definidos da mesma forma que os modelos centrais, com o valor médio η sendo substituído por um valor real qualquer a .

Não é difícil demonstrar que:

$$\mu_n = \sum_{i=0}^n \binom{n}{i} m_i (-\eta)^{n-i}$$

e

$$m_n = \sum_{i=0}^n \binom{n}{i} \mu_i \eta^{n-i}$$

3.1.7 Função característica e função geratriz de momento

A função característica de uma variável aleatória $X(v)$ é definida como sendo a transformada de Fourier da sua função densidade de probabilidade:

$$\Phi(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{i\omega x} dx = E\{e^{i\omega x}\}$$

de onde:

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(\omega) e^{-i\omega x} d\omega$$

Como $f(x) \geq 0$ é integrável, $|\Phi(\omega)| \leq \Phi(0) = 1$

A função geratriz de momento é definida como:

$$\Theta(s) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{sx} dx = E\{e^{s(X(v))}\} \quad (3.1.9)$$

onde s é, de uma forma geral, um número complexo.

No caso de uma variável aleatória $X(v)$ discreta:

$$\Phi(\omega) = \sum_j p_j e^{i\omega x_j}$$

onde p_j é a probabilidade $P\{X(v) = x_j\}$. Quando a variável aleatória $X(v)$ assume apenas valores inteiros:

$$\Phi(\omega) = \sum_{-\infty}^{\infty} p_n z^n$$

com:

$$z = e^{i\omega}$$

Se a variável aleatória $X(v)$ se limitar ao conjunto dos inteiros positivos, mais o número zero:

$$\Phi(\omega) = \sum_0^{\infty} p_n z^n$$

ou:

$$\Phi(\omega) = \Gamma\left(\frac{1}{z}\right)$$

onde $\Gamma(z)$ é a transformada zeta unilateral da variável complexa z .

Da equação 3.1.9 tem-se que:

$$\frac{d^{(k)}\Theta}{ds^{(k)}} = \int_{-\infty}^{\infty} x^k f(x) e^{sx} dx = E\{X(v)^k e^{sX(v)}\}$$

$$\text{e:} \quad (3.1.10)$$

$$\left(\frac{d^{(k)}\Theta}{ds^{(k)}}\right)_{s=0} = E\{X(v)^k\} = m_k$$

No caso de uma variável aleatória $N(v)$ inteira e positiva com a função geratriz expressa na forma de uma transformada zeta:

$$\frac{d^k \Gamma\left(\frac{1}{z}\right)}{d\left(\frac{1}{z}\right)^k} = E\{N(v)(N(v)-1)\dots(N(v)-k+1)z^{N(v)-k}\}$$

$$\text{e:} \quad (3.1.11)$$

$$\frac{d^k \Gamma(1)}{d\left(\frac{1}{z}\right)^k} = E\{N(v)(N(v)-1)\dots(N(v)-k+1)\}$$

As equações 3.1.10 e 3.1.11 são expressões do que se costuma chamar de teorema do momento.

3.2 Duas variáveis aleatórias

Considere duas variáveis aleatórias $X_1(v)$ e $X_2(v)$, com funções de probabilidade cumulativa $F_{X_1}(x_1)$ e $F_{X_2}(x_2)$. A probabilidade do evento $\{X_1(v) \leq x_1\} \cap \{X_2(v) \leq x_2\}$ não pode ser definida a partir das funções de distribuição $F_{X_1}(x_1)$ e $F_{X_2}(x_2)$ uma vez que as duas funções não contemplam a possibilidade de intersecção entre os eventos $\{X_1(v) \leq x_1\}$ e $\{X_2(v) \leq x_2\}$.

Define-se como função cumulativa conjunta de probabilidade como:

$$F_{X_1, X_2}(x_1, x_2) = P(\{X_1(v) \leq x_1\} \cap \{X_2(v) \leq x_2\})$$

onde x_1 e x_2 são números reais arbitrários.

Os eventos $\{X_1(v) \leq x_1\}$ e $\{X_2(v) \leq x_2\}$ pertencem ao conjunto dos números reais \mathbb{R} , enquanto que o evento $\{X_1(v) \leq x_1\} \cap \{X_2(v) \leq x_2\}$ pertence ao produto cartesiano $\mathbb{R} \times \mathbb{R}$, ou a \mathbb{R}^2 . O evento $\{X_1(v) \leq x_1\}$ é isomorfo ao evento $\{\{X_1(v) \leq x_1\} \cap \{X_2(v) < \infty\}\}$ uma vez que esse evento de \mathbb{R}^2 independe da variável $X_2(v)$. Da mesma forma, o evento $\{\{X_2(v) \leq x_2\}\}$ é isomorfo ao evento $\{X_1(v) < \infty \cap X_2(v) \leq x_2\}$ uma vez que esse evento de \mathbb{R}^2 independe da variável $X_1(v)$.

Por outro lado:

$$\{\{X_1(v) \leq x_1\} \cap \{X_2(v) \leq x_2\}\} \subset \{\{X_1(v) \leq x_1\} \cap \{X_2(v) \leq \infty\}\}$$

e:

$$\{\{X_1(v) \leq x_1\} \cap \{X_2(v) \leq x_2\}\} \subset \{\{X_1(v) \leq \infty\} \cap \{X_2(v) \leq x_2\}\}$$

Em particular:

$$\{\{X_1(v) \leq -\infty\} \cap \{X_2(v) \leq x_2\}\} \subset \{\{X_1(v) \leq -\infty\} \cap \{X_2(v) \leq \infty\}\}$$

e:

$$\{\{X_1(v) \leq x_1\} \cap \{X_2(v) \leq -\infty\}\} \subset \{\{X_1(v) \leq \infty\} \cap \{X_2(v) \leq -\infty\}\}$$

Como $P\{X_1(v) = -\infty\}$ e $P\{X_2(v) = -\infty\}$ são definidas como sendo iguais a zero, $F_{X_1, X_2}(x_1, -\infty) = F_{X_1, X_2}(-\infty, x_2) = 0$. Por outro lado $F_{X, Y}(\infty, \infty) = P\{\mathbb{R}^2 = \text{conjunto universo}\} = 1$.

O evento:

$$\{\{x_{1_1} < X_1(v) \leq x_{1_2}\} \cap \{X_2(v) \leq x_2\}\} =$$

$$\{\{X_1(v) \leq x_{1_2}\} \cap \{X_2 \leq x_2\} - \{X_1(v) \leq x_{1_1}\} \cap \{X_2 \leq x_2\}\}$$

tem a probabilidade:

$$P\{\{x_{1_1} < X_1(v) \leq x_{1_2}\} \cap \{X_2 \leq x_2\}\} =$$

$$P\{\{X_1(v) \leq x_{1_2}\} \cap \{X_2(v) \leq x_2\}\} - P\{X_1(v) \leq x_{1_1}\} \cap \{X_2(v) \leq x_2\}\}$$

ou seja:

$$P\{\{x_{1_1} < X_1(v) \leq x_{1_2}\} \cap \{X_2(v) \leq x_2\}\} =$$

$$F_{X_1, X_2}(x_{1_2}, x_2) - F_{X_1, X_2}(x_{1_1}, x_2)$$

Da mesma forma:

$$P\{\{X_1(v) \leq x_1\} \cap \{x_{2_1} < X_2(v) \leq x_{2_2}\}\} =$$

$$F_{X_1, X_2}(x_1, x_{2_2}) - F_{X_1, X_2}(x_1, x_{2_1})$$

O evento:

$$\begin{aligned} & \{\{x_{1_1} < X_1(v) \leq x_{1_2}\} \cap \{x_{2_1} < X_2(v) \leq x_{2_2}\}\} = \\ & \{\{x_{1_1} < X_1(v) \leq x_{1_2}\} \cap \{X_2(v) \leq x_{2_2}\} - \\ & \{x_{1_1} < X_1(v) \leq x_{1_2}\} \cap \{X_2(v) \leq x_{2_1}\}\} \end{aligned}$$

de onde:

$$\begin{aligned} & P\{\{x_{1_1} < X_1(v) \leq x_{1_2}\} \cap \{x_{2_1} < X_2(v) \leq x_{2_2}\}\} = \\ & P\{\{x_{1_1} < X_1(v) \leq x_{1_2}\} \cap \{X_2(v) \leq x_{2_2}\} - \\ & P\{x_{1_1} < X_1(v) \leq x_{1_2}\} \cap \{X_2(v) \leq x_{2_1}\}\} = \\ & P\{\{X_1(v) \leq x_{1_2}\} \cap \{X_2(v) \leq x_{2_2}\}\} - P\{\{X_1(v) \leq x_{1_1}\} \cap \{X_2(v) \leq x_{2_2}\}\} - \\ & P\{\{X_1(v) \leq x_{1_2}\} \cap \{X_2(v) \leq x_{2_1}\}\} + P\{\{X_1(v) \leq x_{1_1}\} \cap \{X_2(v) \leq x_{2_1}\}\} \end{aligned}$$

ou:

$$\begin{aligned} & P\{\{x_{1_1} < X_1(v) \leq x_{1_2}\} \cap \{x_{2_1} < X_2(v) \leq x_{2_2}\}\} = \\ & F_{X_1, X_2}(x_{1_2}, x_{2_2}) - F_{X_1, X_2}(x_{1_1}, x_{2_2}) - \\ & F_{X_1, X_2}(x_{1_2}, x_{2_1}) + F_{X_1, X_2}(x_{1_1}, x_{2_1}) \end{aligned}$$

A função de densidade de probabilidade conjunta f_{X_1, X_2} é definida como :

$$f_{X_1, X_2}(x_1, x_2) \equiv \frac{\partial^2 F_{X_1, X_2}}{\partial x_1 \partial x_2}$$

de onde:

$$F_{X_1, X_2}(x_1, x_2) = \int_{-\infty}^{x_1} \int_{-\infty}^{x_2} f_{X_1, X_2}(\xi, \eta) d\xi d\eta$$

A probabilidade de um evento $(X_1(v), X_2(v))$ estar contido em uma região (ver o apêndice deste capítulo) D pertencente a \mathbb{R}^2 é:

$$P\{(X_1(v), X_2(v)) \in D\} = \int_D \int f_{X_1, X_2}(\xi, \eta) d\xi d\eta$$

Como os eventos $\{X_1(v) \leq x_1\}$, com $X_1(v)$ pertencente a \mathbb{R} , e $\{\{X_1(v) \leq x_1\} \cap X_2(v) \leq x_2 < \infty\}\}$, com $(X_1(v), X_2(v))$ pertencente a \mathbb{R}^2 , são isomorfos:

$$P\{X_1(v) \leq x_1\} = P\{X_1(v) \leq x_1\} \cap \{X_2 < \infty\}$$

de onde:

$$F_{X_1}(x_1) = F_{X_1, X_2}(x_1, \infty)$$

ou seja:

$$f_{X_1}(x_1) = \int_{-\infty}^{\infty} f_{X_1, X_2}(x_1, x_2) dx_2$$

Da mesma forma:

$$F_{X_2}(x_2) = F_{X_1, X_2}(\infty, x_2)$$

e:

$$f_{X_2}(x_2) = \int_{-\infty}^{\infty} f_{X_1, X_2}(x_1, x_2) dx_1$$

3.2.1 Independência estatística

Considere que $X_1(v)$ e $X_2(v)$ são duas variáveis aleatórias definidas, respectivamente, sobre os eixos reais \mathbf{x}_1 e \mathbf{x}_2 . Se A e B são dois subconjuntos do eixo \mathbf{x}_1 e do eixo \mathbf{x}_2 , os eventos $\{X_1(v) \in A\}$ e $\{X_2(v) \in B\}$ são estatisticamente independentes se:

$$P\{\{X_1(v) \in A\} \cap \{X_2(v) \in B\}\} = P\{X_1(v) \in A\}P\{X_2(v) \in B\} \quad (3.2.12)$$

Se $A = (-\infty, x_1]$ e $B = (-\infty, x_2]$ e os eventos $\{X_1(v) \leq x_1\}$ e $\{X_2(v) \leq x_2\}$ forem estatisticamente independentes então, da definição de probabilidade cumulativa e de densidade de probabilidade:

$$F_{X_1, X_2}(x_1, x_2) = F_{X_1}(x_1)F_{X_2}(x_2)$$

$$\text{e:} \quad (3.2.13)$$

$$f_{X_1, X_2}(x_1, x_2) = f_{X_1}(x_1)f_{X_2}(x_2)$$

Por outro lado, se a equação 3.2.13 for verdadeira, em qualquer que seja o domínio de \mathbb{R}^2 , a equação 3.2.12 é válida.

Considere agora que $X_1(v)$ e $X_2(v)$ são duas variáveis aleatórias e considere duas funções de uma variável real g_1 e g_2 . Duas novas variáveis aleatórias $Y_1(v)$ e $Y_2(v)$ podem ser definidas na forma $Y_1(v) = g_1(X_1(v))$ e $Y_2(v) = g_2(X_2(v))$.

Se $Y_1(v) \leq y_1$, onde y_1 é um número real arbitrário, então $X_1(v) \in R_{y_1}$, onde R_{y_1} é o conjunto solução da inequação $y_1 \leq g_1(x)$. Nesse caso os eventos $\{X_1(v) \in R_{y_1}\}$ e $\{Y_1(v) \leq y_1\}$ são iguais. Da mesma forma $\{X_2(v) \in R_{y_2}\} = \{Y_2(v) \leq y_2\}$. Como $X_1(v)$ e $X_2(v)$ são independentes, $Y_1(v)$ e $Y_2(v)$ também são.

3.2.2 Independência entre experimentos aleatórios

Dois espaços de probabilidade V_1 e V_2 são independentes quando, para qualquer $\{A \in V_1\}$ e para qualquer $\{B \in V_2\}$, ocorrer que $P\{\{A \in V_1\} \cap \{B \in V_2\}\} = P\{A \in V_1\}P\{B \in V_2\}$.

Considere agora dois espaços de probabilidade V_1 e V_2 e o produto cartesiano desses espaços $V_1 \times V_2$. Considere também que a variável aleatória $X_1(v_1)$ é definida exclusivamente para os resultados elementares de V_1 e a variável aleatória $X_2(v_2)$ é definida exclusivamente para os resultados elementares de V_2 . Isso significa que a variável aleatória X_1 calculada para um ponto $(v_1, v_2) \in V_1 \times V_2$ fornece $X_1(v_1)$, o mesmo acontecendo com X_2 . Se os espaços de probabilidade V_1 e V_2 forem independentes, as variáveis aleatórias $X_1(v_1)$ e $X_2(v_2)$ são independentes também, uma vez que ela se referem a subconjuntos de V_1 e de V_2 .

3.3 Função de duas variáveis aleatórias

Considere duas variáveis aleatórias $X_1(v)$ e $X_2(v)$ e uma função $x_3 = g(x_1, x_2)$ de duas variáveis reais com a restrição de que o conjunto solução da inequação:

$$x_{3_0} \leq g(x_1, x_2)$$

seja formado pela união e/ou intersecção $R_{x_{3_0}}$ de um conjunto enumerável de regiões no plano \mathbb{R}^2 .

Definindo uma nova variável $X_3(v)$ na forma:

$$X_3(v) = g(X_1(v), X_2(v))$$

a probabilidade do evento $\{X_3(v) \leq x_{3_0}\}$ é dada por:

$$P\{X_3(v) \leq x_{3_0}\} = P\{(X_1(v), X_2(v)) \in R_{x_{3_0}}\}$$

ou:

$$F_{X_3}(x_3) = P\{(X_1(v), X_2(v)) \in R_{x_{3_0}}\} = \int_{R_{x_{3_0}}} \int f_{X_1, X_2}(x_1, x_2) dx_1 dx_2$$

A função densidade de probabilidade da variável $X_3(v)$ é definida através da diferencial de $F_{X_3}(x_3)$:

$$P\{x_3 < X_3(v) \leq x_3 + \Delta x_3\} = \Delta F_{X_3} = f_{X_3}(x_3) \Delta x_3 =$$

$$\int_{\Delta R_{x_{3_0}}} \int f_{X_1, X_2}(x_1, x_2) dx_1 dx_2$$

onde $\Delta R_{x_{3_0}}$ é a variação da região $R_{x_{3_0}}$ correspondente à variação Δx_3 .

A expressão de f_{x_3} depende de g e nem sempre é possível expressar f_{X_3} de forma fechada. Por exemplo, se $x_3 = x_1 + x_2$, a expressão de F_{X_3} é:

$$F_{X_3}(x_3) = P\{X_3(v) \leq x_3 = x_1 + x_2\} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{x_3 - x_2} f_{X_1, X_2}(x_1, x_2) dx_1 dx_2$$

Derivando F_{X_3} em relação a x_3 , tem-se:

$$f_{X_3}(x_3) = \int_{-\infty}^{\infty} f_{X_1, X_2}(x_3 - x_2, x_2) dx_2$$

No caso em que as variáveis aleatórias $X_1(v)$ e $X_2(v)$ serem independentes:

$$f_{X_3}(x_3) = \int_{-\infty}^{\infty} f_{X_1}(x_3 - x_2) f_{X_2}(x_2) dx_2$$

o que significa, no caso em que a variável aleatória $X_3(v)$ é igual a soma de outras duas variáveis independentes, que a função densidade de probabilidade de $X_3(v)$ é igual à convolução das funções de densidade dessas duas variáveis aleatórias.

3.4 Duas funções de duas variáveis aleatórias

Considere duas variáveis aleatórias $X_1(v)$ e $X_2(v)$ e duas funções de duas variáveis reais $y_1 = g(x_1, x_2)$ e $y_2 = h(x_1, x_2)$ que permitem definir duas novas variáveis aleatórias $Y_1(v) = g(X_1(v), X_2(v))$ e $Y_2(v) = h(X_1(v), X_2(v))$.

Para que isso ocorra, os domínios das funções g e h devem incluir os conjuntos imagem de $X_1(v)$ e $X_2(v)$. É importante lembrar aqui que uma variável aleatória é uma função que a cada evento elementar do espaço de probabilidades associa um número real. Além disso, as funções g e h devem satisfazer a condição de que os conjuntos solução das inequações:

$$y_{1_0} \leq g(x_1, x_2) \text{ e } y_{2_0} \leq h(x_1, x_2)$$

para todo par y_{1_0} e y_{2_0} real fixo, sejam compostos de uniões e/ou intersecções de um conjunto finito, ou infinito mas enumerável, de regiões em \mathbb{R}^2 . Por fim, $g(X_1(v), X_2(v))$ e $h(X_1(v), X_2(v))$ devem ter probabilidade nula quando $X_1(v)$ ou $X_2(v)$, ou ambas simultaneamente, tendam a menos infinito.

Como as variáveis $X_1(v)$ e $X_2(v)$ têm uma densidade de probabilidade conjunta $f_{X_1, X_2}(x_1, x_2)$ a pergunta que pode ser feita é: como a função densidade de probabilidade conjunta de $Y_1(v)$ e $Y_2(v)$ pode ser expressa em termos de $f_{X_1, X_2}(x_1, x_2)$?

Considere que o sistema:

$$y_{1_0} = g(x_1, x_2) \text{ e } y_{2_0} = h(x_1, x_2) \quad (3.4.14)$$

tenha um conjunto finito, ou infinito mas enumerável, de soluções na forma:

$$\{(x_{1_j}, x_{2_j}), \text{ com } j = 1, 2, 3, \dots, n, \dots\}$$

Em função das propriedades das funções g e h , dados dois intervalos Δy_1 e Δy_2 das variáveis y_1 e y_2 :

$$P\left\{\left\{y_{1_0} - \frac{\Delta y_1}{2} < Y_1(v) \leq y_{1_0} + \frac{\Delta y_1}{2}\right\} \times \left\{y_{2_0} - \frac{\Delta y_2}{2} < Y_2(v) \leq y_{2_0} + \frac{\Delta y_2}{2}\right\}\right\} =$$

$$P\{(X_1(v), X_2(v)) \in R_{Y_1, Y_2}\}$$

onde R_{Y_1, Y_2} é composto pela união e/ou intersecção de regiões ΔS_j no plano real (x_1, x_2) . As regiões ΔS_j incluem as soluções (x_{1_j}, x_{2_j}) do sistema 3.4.14.

Uma vez que as raízes de 3.4.14 são pontos isolados, sempre é possível escolher Δy_1 e Δy_2 pequenos o suficiente para que as regiões ΔS_j não tenham intersecção e, nesse caso:

$$\int_{y_{2_0} - \Delta y_2/2}^{y_{2_0} + \Delta y_2/2} \int_{y_{1_0} - \Delta y_1/2}^{y_{1_0} + \Delta y_1/2} f_{Y_1, Y_2}(y_1, y_2) dy_1 dy_2 = \sum_j \int_{R_{Y_1, Y_2}} \int f_{X_1, X_2}(x_1, x_2) dx_1 dx_2 \quad (3.4.15)$$

A equação 3.4.15 pode ser escrita na forma;

$$f_{Y_1, Y_2}(\bar{y}_1, \bar{y}_2) \Delta y_1 \Delta y_2 = \sum_j f_{X_1, X_2}(\bar{x}_{1_j}, \bar{x}_{2_j}) \Delta S_j \quad (3.4.16)$$

onde o ponto (\bar{y}_1, \bar{y}_2) está contido na região $\Delta y_1 \Delta y_2$ centrada em (y_{1_0}, y_{2_0}) e o ponto $(\bar{x}_{1_j}, \bar{x}_{2_j})$ está contido na região ΔS_j em torno da raiz (x_{1_j}, x_{2_j}) .

O sistema 3.4.14 pode ser entendido como uma regra de mudança de coordenadas de um sistema ortogonal (y_1, y_2) para um sistema curvilíneo (x_1, x_2) . Usando as regras usuais do cálculo com mais de uma variável, a relação entre $\Delta y_1 \Delta y_2$ e cada um dos ΔS_j é:

$$\Delta y_1 \Delta y_2 \approx \left| \begin{vmatrix} \frac{\partial g}{\partial x_1} & \frac{\partial g}{\partial x_2} \\ \frac{\partial h}{\partial x_1} & \frac{\partial h}{\partial x_2} \end{vmatrix}_{x_{1_j}, x_{2_j}} \right| \Delta S_j \quad (3.4.17)$$

onde:

$$I = \begin{vmatrix} \frac{\partial g}{\partial x_1} & \frac{\partial g}{\partial x_2} \\ \frac{\partial h}{\partial x_1} & \frac{\partial h}{\partial x_2} \end{vmatrix}_{x_{1_j}, x_{2_j}}$$

é o determinante funcional, o jacobiano, ou o determinante de Jacobi, da transformação definida em 3.4.14, calculado em (x_{1_j}, x_{2_j}) . Quando $\Delta y_1 \Delta y_2$ se torna indefinidamente pequeno, ΔS_j se torna indefinidamente pequeno e a aproximação na equação 3.4.17 se transforma em uma identidade.

Substituindo em 3.4.16 e tomando o limite em que $\Delta y_1 \Delta y_2$ se torna indefinidamente pequeno:

$$f_{Y_1, Y_2}(y_{1_0}, y_{2_0}) = \sum_j \frac{f_{X_1, X_2}(x_{1_j}, x_{2_j})}{\left| \begin{vmatrix} \frac{\partial g}{\partial x_1} & \frac{\partial g}{\partial x_2} \\ \frac{\partial h}{\partial x_1} & \frac{\partial h}{\partial x_2} \end{vmatrix}_{x_{1_j}, x_{2_j}} \right|}$$

Deixando y_{1_0}, y_{2_0} variar continuamente em \mathbb{R}^2 se obtém a relação entre as densidades de probabilidade f_{Y_1, Y_2} e f_{X_1, X_2} .

3.5 Valor esperado, covariância e momentos de ordem superior para funções de duas variáveis aleatórias

Sendo a variável aleatória $Y(v)$ sendo definida como uma função de duas variáveis aleatórias $X_1(v)$ e $X_2(v)$ através da função $y = g(x_1, x_2)$ tem-se que a variância de $Y(v)$:

$$E\{Y(v)\} = \int_{-\infty}^{\infty} y f_Y(y) dy$$

pode ser expressa em termos da função g e da densidade de probabilidade conjunta f_{x_1, x_2} na forma:

$$E\{g(X_1(v), X_2(v))\} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} g(x_1, x_2) f_{X_1, X_2}(x_1, x_2) dx_1 dx_2$$

A covariância C_{X_1, X_2} entre duas variáveis aleatórias $X_1(v)$ e $X_2(v)$ é definida como:

$$C_{X_1, X_2} = E\{(X_1(v) - \eta_{x_1})(X_2(v) - \eta_{x_2})\} = E\{X_1(v)X_2(v)\} - E\{X_1(v)\}E\{X_2(v)\}$$

onde η_{X_1} e η_{X_2} são, respectivamente, o valor esperado de $X_1(v)$ e o valor esperado de $X_2(v)$.

As covariâncias C_{X_1, X_1} e C_{X_2, X_2} são as variâncias de $X_1(v)$ e de $X_2(v)$ e são algumas vezes representadas por $\sigma_{X_1}^2$ e $\sigma_{X_2}^2$, ou por $\text{var}(X_1(v))$ e $\text{var}(X_2(v))$, respectivamente. A raiz quadrada das variâncias são os desvios padrão das variáveis $X_1(v)$ e $X_2(v)$, representados por σ_{X_1} e σ_{X_2} , respectivamente.

O coeficiente de correlação r_{X_1, X_2} entre essas variáveis é definido como:

$$r_{X_1, X_2} = \frac{C_{X_1, X_2}}{\sigma_{X_1} \sigma_{X_2}} \quad (3.5.18)$$

Uma vez que:

$$E\{(a(X_1 - \eta_{X_1}) + (X_2 - \eta_{X_2}))^2\} = a^2 \sigma_{X_1}^2 + 2aC_{X_1, X_2} + \sigma_{X_2}^2$$

é sempre uma forma quadrática positiva ou nula em para qualquer a real, o discriminante $C_{X_1, X_2}^2 - \sigma_{X_1}^2 \sigma_{X_2}^2$ é sempre menor ou igual a zero e, em consequência da equação 3.5.18, tem-se que $-1 \leq r \leq 1$.

As variáveis X_1 e X_2 não são correlacionadas quando $C_{X_1, X_2} = 0$, ou $r_{X_1, X_2} = 0$, o que implica em $E\{X_1(v)X_2(v)\} = E\{X_1(v)\}E\{X_2(v)\}$. Note que se X_1 e X_2 forem independentes, elas não são correlacionadas. As variáveis X_1 e X_2 são ortogonais quando $E\{X_1(v)X_2(v)\} = 0$.

É importante notar que se as variáveis aleatórias $X_1(v)$ e $X_2(v)$ forem independentes, $Y_1(v) = g(X_1(v), X_2(v))$ e $Y_2(v) = h(X_1(v), X_2(v))$ também são independentes. No entanto, de uma forma geral, o fato de $X_1(v)$ e $X_2(v)$ serem não correlacionadas não implica que $Y_1(v)$ e $Y_2(v)$ também o sejam.

Os momentos conjuntos das variáveis $X_1(v)$ e $X_2(v)$ são definidos como:

$$m_{k,l} = E\{X_1^k X_2^l\} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x_1^k x_2^l f_{X_1, X_2}(x_1, x_2) dx_1 dx_2$$

e os momentos centrais são definidos como:

$$\mu_{k,l} = E\{(X_1 - \eta_{X_1})^k (X_2 - \eta_{X_2})^l\} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (x_1 - \eta_{X_1})^k (x_2 - \eta_{X_2})^l f_{X_1, X_2}(x_1, x_2) dx_1 dx_2$$

Define-se como função característica conjunta $\Phi(\omega_1 \omega_2)$ das variáveis aleatórias $X_1(v)$ e $X_2(v)$ como $E\{\exp(i(\omega_1 x_1 + \omega_2 x_2))\}$, que corresponde à transformada dupla de Fourier da função densidade de probabilidade conjunta f_{x_1, X_2} . Se $X_1(v)$ e $X_2(v)$ forem independentes $E\{\exp(i(\omega_1 x_1 + \omega_2 x_2))\} = E\{\exp(i\omega_1 x_1)\}E\{\exp(i\omega_2 x_2)\}$.

3.6 Vetores de variáveis aleatórias

Um vetor $\vec{X}(v)$ de variáveis aleatórias com dimensão n é um vetor cujas n componentes são variáveis aleatórias:

$$\vec{X}(v) = \begin{bmatrix} X_1(v) \\ X_2(v) \\ X_3(v) \\ \dots \\ X_n(v) \end{bmatrix}$$

No caso de um espaço de probabilidade não enumerável⁵, a função distribuição de probabilidade conjunta $F_{\vec{X}}(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$ do vetor aleatório $\vec{X}(v)$ é definida como:

$$F_{\vec{X}}(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) =$$

$$P\{\{X_1(v) \leq x_1\} \cap \{X_2(v) \leq x_2\} \cap \dots \cap \{X_n(v) \leq x_n\}\}$$

e a função densidade de probabilidade conjunta $f_{\vec{X}}(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$ é definida como:

$$f_{\vec{X}}(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) = \frac{\partial^n F_{\vec{X}}(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)}{\partial x_1 \partial x_2 \partial x_3 \dots \partial x_n}$$

A probabilidade de que $\vec{X}(v)$ esteja na região D do domínio n -dimensional é:

$$P\{\vec{X}(v) \in D\} = \int_D f_{\vec{X}}(\vec{x}) d\vec{x} =$$

$$\int \int \dots \int_D \dots \int f_{\vec{X}}(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) dx_1 dx_2 dx_3 \dots dx_n$$

onde:

$$\vec{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix}$$

Dado o vetor de funções:

$$\vec{g}(\vec{x}) = \begin{bmatrix} g_1(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) \\ g_2(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) \\ g_3(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) \\ \dots \\ g_n(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) \end{bmatrix}$$

um novo vetor de variáveis aleatórias $\vec{Y}(v)$ pode ser definido como $\vec{Y}(v) = \vec{g}(\vec{X}(v))$ ou:

⁵No caso de espaços de probabilidade finitos, ou infinitos, mas enumeráveis, o tratamento dos vetores aleatórios é equivalente ao tratamento já descrito para o caso de variáveis aleatórias discretas.

$$\begin{bmatrix} Y_1(v) \\ Y_2(v) \\ Y_3(v) \\ \dots \\ Y_n(v) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_1(X_1(v), X_2(v), X_3(v), \dots, X_n(v)) \\ g_2(X_1(v), X_2(v), X_3(v), \dots, X_n(v)) \\ g_3(X_1(v), X_2(v), X_3(v), \dots, X_n(v)) \\ \dots \\ g_n(X_1(v), X_2(v), X_3(v), \dots, X_n(v)) \end{bmatrix}$$

Existem poucas restrições impostas sobre $g_j(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$. A imagem do vetor aleatório $\vec{X}(v)$ tem que estar contida no domínio de $\vec{g}(\vec{x})$, as funções $g_j(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$ devem ser contínuas por partes e:

$$P\{g_j(X_1(v), X_2(v), X_3(v), \dots, X_n(v))\} \longrightarrow -\infty\} = 0$$

e:

$$P\{g_j(X_1(v), X_2(v), X_3(v), \dots, X_n(v))\} \longrightarrow \infty\} = 0$$

Além disso, o conjunto $R_{\vec{y}_0}$ solução da inequação:

$$\vec{y}_0 \leq \vec{g}(\vec{x})$$

ou do sistema de inequações:

$$y_{j_0} \leq g_j(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$$

com $j = 1, 2, \dots, n$, onde \vec{y}_0 é um vetor arbitrário e fixo do conjunto imagem da função $\vec{y} = \vec{g}(\vec{x})$ deve ser composto por uniões/intersecções de um conjunto enumerável de regiões do espaço \mathbb{R}^n .

Com essas condições, a distribuição de probabilidade $F_{\vec{Y}}(\vec{y}_0)$ é dada por:

$$P\{\vec{Y}(v) = \vec{g}(\vec{X}(v)) \leq \vec{y}_0\} = P\{\vec{X}(v) \in R_{\vec{y}_0}\}$$

A densidade de probabilidade $f_{\vec{Y}}(\vec{y}) = f_{Y_1, Y_2, \dots, Y_n}(y_1, y_2, \dots, y_n)$ pode ser expressa em termos de $f_{\vec{X}}(\vec{x}) = f_{X_1, X_2, \dots, X_n}(x_1, x_2, \dots, x_n)$ seguindo o procedimento descrito no 3.4. O sistema:

$$\begin{bmatrix} y_{1_0} \\ y_{2_0} \\ y_{3_0} \\ \dots \\ y_{n_0} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_1(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) \\ g_2(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) \\ g_3(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) \\ \dots \\ g_n(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) \end{bmatrix}$$

onde \vec{y}_0 é um vetor arbitrário fixo do conjunto imagem da função $\vec{y} = \vec{g}(\vec{x})$, é resolvido gerando um conjunto de soluções que pode ser vazio, conter um único elemento \vec{x}_0 ou um conjunto de soluções \vec{x}_{0_j} com $j = 1, 2, \dots, n_s$. A função densidade de probabilidade $f_{Y_1, Y_2, \dots, Y_n}(y_1, y_2, \dots, y_n)$ é dada por:

$$f_{Y_1, Y_2, \dots, Y_n}(y_{1_0}, y_{2_0}, \dots, y_{n_0}) = \sum_{j=1}^{n_s} \frac{f_{X_1, X_2, \dots, X_n}(x_{1_{0_j}}, x_{2_{0_j}}, \dots, x_{n_{0_j}})}{|J(x_{1_{0_j}}, x_{2_{0_j}}, \dots, x_{n_{0_j}})|} \quad (3.6.19)$$

onde o jacobiano da transformação, $J(x_{10_j}, x_{20_j}, \dots, x_{n0_j})$, é:

$$J(x_{10_j}, x_{20_j}, \dots, x_{n0_j}) = \begin{vmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial x_1} & \frac{\partial g_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial g_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial g_2}{\partial x_1} & \frac{\partial g_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial g_2}{\partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial g_n}{\partial x_1} & \frac{\partial g_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial g_n}{\partial x_n} \end{vmatrix}_{(x_{10_j}, x_{20_j}, \dots, x_{n0_j})} \quad (3.6.20)$$

As componentes $X_j(v)$ do vetor de variáveis aleatórias são independentes quando os eventos $\{X_j(v) \leq x_j\}$ com $j = 1, 2, \dots, n$ são independentes, ou seja a interseção entre os eventos é o conjunto vazio. Nesse caso:

$$F_{X_1, X_2, \dots, X_n}(x_1, x_2, \dots, x_n) = F_{X_1}(x_1)F_{X_2}(x_2) \cdots F_{X_n}(x_n)$$

e:

$$f_{X_1, X_2, \dots, X_n}(x_1, x_2, \dots, x_n) = f_{X_1}(x_1)f_{X_2}(x_2) \cdots f_{X_n}(x_n)$$

As componentes do vetor aleatório podem formar grupos de variáveis independentes entre si. Por exemplo um grupo $G_{1,J}$, formado pelas componentes $X_j(v)$, com $j = 1, 2, \dots, J$, e um grupo $G_{J,n}$, formado pelas componentes $X_j(v)$, com $j = J+1, 2, \dots, J$, cujos eventos $\{X_j(v) \leq x_j\}$ de cada grupo são independentes. Nesse caso:

$$F_{X_1, X_2, \dots, X_n}(x_1, x_2, \dots, x_n) = F_{X_1, X_2, \dots, X_J}(x_1, x_2, \dots, x_J) F_{X_{J+1}, X_2, \dots, X_n}(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

e:

$$f_{X_1, X_2, \dots, X_n}(x_1, x_2, \dots, x_n) = f_{X_1, X_2, \dots, X_J}(x_1, x_2, \dots, x_J) f_{X_{J+1}, X_2, \dots, X_n}(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

Vetores aleatórios complexos podem ser definidos na forma $\vec{Z}(v) = [Z_j(v)] = [X_j(v) + iY_j(v)]$ onde i é a variável complexa, respeitando-se as regras da álgebra complexa. A função densidade de probabilidade do vetor complexo $Z(v)$ é $f_{\vec{Z}}(\vec{z}) = f_{X_1, Y_1, X_2, Y_2, \dots, X_n, Y_n}(x_1, y_1, x_2, y_2, \dots, x_n, y_n)$. No caso de componentes complexas independentes:

$$f_{X_1, Y_1, X_2, Y_2, \dots, X_n, Y_n}(x_1, y_1, x_2, y_2, \dots, x_n, y_n) = f_{X_1}(x_1, y_1) f_{X_2, Y_2}(x_2, y_2) \cdots f_{X_n, Y_n}(x_n, y_n)$$

3.6.1 Matriz de covariância

Considerando um vetor aleatório complexo:

$$\vec{Z}(v) = \begin{bmatrix} z_1(v) \\ z_2(v) \\ z_3(v) \\ \dots \\ z_n(v) \end{bmatrix}$$

a covariância entre duas componentes j e k é definida como por:

$$C_{j,k} = E\{(Z_j(v) - E\{Z_j(v)\})(\bar{Z}_k(v) - E\{\bar{Z}_k(v)\})\} = E\{Z_j(v)\bar{Z}_k(v)\} - E\{Z_j(v)\}E\{\bar{Z}_k(v)\} \quad (3.6.21)$$

onde $\bar{Z}_j(v) = X_j(v) - iY_j(v)$ é o complexo conjugado de $Z_j(v)$. No caso de uma variável real, $Y_j(v) = 0$, a definição de covariância corresponde à definição dada no capítulo 3. Quando j é igual a k a equação 3.6.21 fornece a variância componente aleatória $Z_j(v)$.

As covariâncias $C_{j,k}$ entre os possíveis pares de componentes aleatórias podem ser unificados na forma de uma matriz, conhecida como matriz de covariância:

$$\mathbf{C}_n = \begin{bmatrix} C_{1,1} & C_{1,2} & \cdots & C_{1,n} \\ C_{2,1} & C_{2,2} & \cdots & C_{2,n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ C_{n,1} & C_{n,2} & \cdots & C_{n,n} \end{bmatrix}$$

Da definição de correlação tem-se que $C_{j,k} = \bar{C}_{k,j}$. Uma matriz com componentes que possuem essa propriedade tem a seguinte característica: $\mathbf{C}_n = \bar{\mathbf{C}}_n^T$ onde $\bar{\mathbf{C}}_n$ representa a matriz formada pelos complexos conjugados dos elementos da matriz \mathbf{C}_n e $\bar{\mathbf{C}}_n^T$ representa a transposição de $\bar{\mathbf{C}}_n$, ou a matriz formada trocando as linhas pela colunas de $\bar{\mathbf{C}}_n$. Matrizes com essa propriedade são chamadas de matrizes hermitianas. Quando a matriz tem componentes reais, a matriz é chamada de simétrica.

Define-se $\mathbf{R}_n = [R_{j,k} = E\{Z_j(v) \bar{Z}_k(v)\}] = E\{\bar{\mathbf{Z}}(v) \mathbf{Z}^T(v)\}$ como sendo a matriz de correlação entre as componentes j e k do vetor aleatório. Da definição de $C_{j,k}$ e de $R_{j,k}$ tem-se que $C_{j,k} = R_{j,k} - E\{Z_j(v)\}E\{\bar{Z}_j(v)\}$ e que $R_{j,k} = \bar{R}_{k,j}$, o que significa que \mathbf{R}_n também é hermitiana.

A toda matriz quadrada \mathbf{B} com n linhas e n colunas se associa uma forma quadrática Q com a forma:

$$Q = \bar{\mathbf{a}}^T \mathbf{B} \mathbf{a} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \bar{a}_i a_j b_{i,j}$$

onde:

$$\mathbf{a} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \cdots \\ a_n \end{bmatrix}$$

é um vetor arbitrário com n componentes, ou uma matriz com n linhas e uma coluna.

Se $Q \geq 0$ a matriz é dita definida não negativa e se $Q \leq 0$, a matriz é dita definida não positiva. Quando $Q > 0$, para todo $\mathbf{a} \neq \vec{0}$, a matriz é chamada de positiva definida e quando $Q < 0$ a matriz é chamada de negativa definida. A matriz correlação \mathbf{R}_n é uma matriz não negativa definida. O valor esperado do quadrado do módulo da combinação linear $a_1 Z_1(v) + a_2 Z_2(v) + \cdots + a_n Z_n(v)$ é:

$$E\{|a_1 Z_1(v) + a_2 Z_2(v) + \cdots + a_n Z_n(v)|^2\} =$$

$$\bar{\mathbf{a}}^T \mathbf{R}_n \mathbf{a} = \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \bar{a}_j a_k E\{Z_j(v) \bar{Z}_k(v)\} \geq 0$$

onde os pesos a_1, a_2, \dots, a_n formam o vetor com componentes complexas \mathbf{a} .

Define-se um conjunto de vetores aleatórios $\bar{Z}_j(v)$ com $j = 1, 2, 3, \dots, n$ como linearmente independentes, quando:

$$E\{\bar{\mathbf{a}}^T \mathbf{R}_n \mathbf{a}\} = E\{|a_1 Z_1(v) + a_2 Z_2(v) + \cdots + a_n Z_n(v)|^2\} > 0$$

para todo $\mathbf{a} \neq \vec{0}$ ou seja, quando \mathbf{R}_n for positiva definida. Se, $\bar{\mathbf{a}}^T \mathbf{R}_n \mathbf{a} = 0$ para algum $\mathbf{a} \neq \vec{0}$, então os vetores aleatórios são linearmente dependentes.

3.7 Processos estocásticos

No capítulo 2, uma variável aleatória $X(v)$ foi definida como uma função, que a todo evento elementar de um espaço de probabilidade $\{\forall v \in V\}$ associa um número real $x = X(v)$. Através das variáveis aleatórias e das suas funções de distribuição se estabelecem as probabilidades dos diversos eventos contidos no espaço de probabilidade.

Um processo estocástico é uma função $X(v, t)$, cujo domínio é o produto cartesiano do conjunto dos eventos elementares de um espaço de probabilidade, tal como acontece na definição de uma variável aleatória, com o conjunto dos números reais, ou um subconjunto T dos números reais. De uma forma geral, se interpreta o conjunto ou o subconjunto real como representando o tempo.

Os processos estocásticos $X(v, t)$ podem ser classificados como processos discretos no tempo, quando assumem um conjunto finito, ou infinito, mas enumerável, de valores. Quando o processo assume um conjunto não enumerável de valores, ele é classificado como um processo contínuo no tempo.

Os processos estocásticos podem ser interpretados de mais de uma forma. Na primeira, tanto $v \in V$ quanto o tempo t são variáveis e o processo estocástico é interpretado como uma variável aleatória que descreve um espaço de probabilidades que se modifica com o tempo, ou evolui com o tempo. Por outro lado, se um evento elementar, ou um subconjunto de eventos elementares $\{v_j, j = 1, 2, \dots, n\} \in V$ é mantido fixo, o processo estocástico é uma função exclusiva do tempo e é interpretado como uma amostra do processo, ou a evolução do subconjunto de eventos elementares com o tempo. Se o tempo for mantido fixo, por exemplo, em t_0 , o processo estocástico se reduz a uma variável aleatória que, junto com a sua função de probabilidade cumulativa, para aquele instante fixo, permite calcular a probabilidade dos diversos eventos do espaço de probabilidade no instante t_0 . Costuma-se dizer que, quando o tempo é mantido fixo, o processo estocástico descreve o **estado** do espaço de probabilidade.

Dois processos estocásticos $X(v, t)$ e $Y(v, t)$ são iguais em todo espaço amostral quando as suas amostras $X(v_j, t)$ e $Y(v_j, t)$ são iguais qualquer que seja o evento elementar particular $v_j \in V$. Dois processos estocásticos são iguais no sentido dos mínimos quadrados, quando:

$$E\{|X(v, t) - Y(v, t)|^2\} = 0$$

para qualquer instante $t \in T$. Em um instante $t \in T$ arbitrário e fixo:

$$E\{|X(v, t) - Y(v, t)|^2\} = R_{X(v, t), X(v, t)} - 2R_{X(v, t), Y(v, t)} + R_{Y(v, t), Y(v, t)}$$

Quando $X(v, t)$ e $Y(v, t)$ são iguais em todo espaço amostral $R_{X(v, t), X(v, t)} = R_{Y(v, t), Y(v, t)} = R_{X(v, t), Y(v, t)}$ e, como consequência, $E\{|X(v, t) - Y(v, t)|^2\} = 0$. O contrário não é sempre verdade.

3.7.1 Valor médio, correlação

No caso de um processo estocástico onde o espaço de probabilidade V é um conjunto de um número infinito e não enumerável de variáveis aleatórias cada uma associada a um valor de $t \in T$, pode-se escrever, para um t fixo:

$$F(x, t) = P\{X(v, t) \leq x\}$$

A função densidade de probabilidade é definida como:

$$f(x, t) = \frac{\partial F(x, t)}{\partial x}$$

As funções $F(x, t)$ e $f(x, t)$ são chamadas, respectivamente, distribuição de probabilidade de primeira ordem. e função densidade de probabilidade de primeira ordem. Dados dois processos estocásticos $X(v, t)$ e $Y(v, t)$, define-se distribuição e função de densidade de segunda ordem, respectivamente, como sendo:

$$F(x, y; t_1, t_2) = P\{X(v, t_1) \leq x \cap Y(v, t_2) \leq y\}$$

e

$$f(x, y; t_1, t_2) = \frac{\partial F(x, y; t_1, t_2)}{\partial x \partial y}$$

Distribuições e funções de densidade de ordem n são definidas de forma análoga.

O valor médio de um processo estocástico varia em função do tempo:

$$\eta(t) = \int_{-\infty}^{\infty} x f(x, t) dx$$

Define-se autocorrelação como:

$$R(t_1, t_2) = E\{X(v, t_1) X(v, t_2)\} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x_1 x_2 f(x_1, x_2; t_1, t_2) dx_1 dx_2$$

onde x_1 se refere ao processo estocástico no instante t_1 e x_2 se refere ao processo estocástico no instante t_2 . A autocorrelação calculada no instante t , ou seja $R(t, t)$, recebe o nome de potência média de $X(v, t)$.

A auto-covariância $C(t_1, t_2)$ é definida como:

$$C(t_1, t_2) = R(t_1, t_2) - \eta(t_1)\eta(t_2)$$

A covariância $C(t, t)$ é a variância de $X(v, t)$.

Expressões correspondentes para o caso de um processo aleatório onde V é finito, ou infinito mas enumerável, são simples de serem obtidas.

3.7.2 Processo estocástico vetorial

Um processo estocástico vetorial é um vetor onde as componentes são, cada uma delas, processos estocásticos. Para processos estocásticos vetoriais, valem as seguintes definições:

1. autocorrelação $\mathbf{R}_{ZZ}(t_1, t_2)$ e auto-covariância de $\mathbf{C}_{ZZ}(t_1, t_2)$:

$$\mathbf{R}_{ZZ}(t_1, t_2) = E\{\vec{Z}(v, t_1) \vec{Z}^T(v, t_2)\}$$

e:

$$C_{ZZ}(t_1, t_2) = R_{ZZ}(t_1, t_2) - \eta(t_1)\bar{\eta}(t_2)$$

2. As matrizes $\mathbf{R}_{ZZ}(t_1, t_2)$ e $\mathbf{C}_{ZZ}(t_1, t_2)$ são hermitianas:

$$\mathbf{R}_{ZZ}(t_1, t_2) = E\{\vec{Z}(v, t_1) \vec{Z}^T(v, t_2)\} = E\{\vec{Z}(v, t_2) \vec{Z}^T(v, t_1)\} = \bar{\mathbf{R}}_{ZZ}(t_2, t_1)$$

e:

$$\mathbf{C}_{ZZ}(t_1, t_2) = \bar{\mathbf{C}}_{ZZ}(t_2, t_1)$$

3. A autocorrelação de processos estocásticos é uma matriz positiva definida:

$$E\{\vec{a}^T \mathbf{R}_{ZZ}(t_1, t_2) \vec{a}\} > 0$$

para todo $\vec{a} \neq \vec{0}$

4. A razão:

$$r_{ZZ}(t_1, t_2) = \frac{C_{ZZ}(t_1, t_2)}{\sqrt{C_{ZZ}(t_1, t_1) C_{ZZ}(t_2, t_2)}}$$

é o coeficiente de correlação do processo estocástico.

5. Correlação cruzada e covariância cruzada entre dois processos estocásticos vetoriais $X(v, t)$ e $Y(v, t)$ complexos:

$$\mathbf{R}_{XY}(t_1, t_2) = E\{\vec{X}(v, t_1) \vec{Y}^T(v, t_2)\}$$

e:

$$C_{XY}(t_1, t_2) = R_{XY}(t_1, t_2) - \eta_X(t_1) \bar{\eta}_Y(t_2)$$

6. Dois processos estocásticos vetoriais são ortogonais quando:

$$R_{XY}(t_1, t_2) = 0$$

para cada t_1 e t_2 .

7. Dois processos estocásticos vetoriais são não correlacionados quando :

$$C_{XY}(t_1, t_2) = 0$$

para cada t_1 e t_2

3.7.3 Processos estocásticos estacionários

Um processo estocástico é dito estacionário em senso estrito se as propriedades estatísticas do processo $X(v, t_0)$ são iguais às propriedades estatísticas de $X(v, t_0 + c)$ para qualquer que seja t_0 e qualquer que seja c . Dois processos estocásticos $X(v, t)$ e $Y(v, t)$ são conjuntamente estacionários no senso estrito se eles tiverem a mesmas propriedades estatísticas conjuntas para $X(v, t_0)$ e $Y(v, t_0)$ e para $X(v, t_0 + c)$ e $Y(v, t_0 + c)$.

Um processo estocástico é dito estacionário em senso lato se:

$$E\{X(v, t)\} = \eta$$

e:

$$E\{\vec{X}(v, t + \tau) \vec{X}^T(v, t)\} = \mathbf{R}(\tau)$$

ou seja o valor médio não depende do tempo, e a matriz de correlação depende apenas da diferença τ entre os tempos t e $t + \tau$.

3.8 Convergência de seqüências de números aleatórios

3.8.1 Convergência certa e convergência quase certa

Considere um espaço de probabilidade formado por um conjunto finito, ou infinito mas enumerável, de eventos elementares $V = \{v_1, v_2, \dots, v_k, \dots\}$ e um conjunto infinito mas enumerável de variáveis aleatórias $\{X_1(v), X_2(v), \dots, X_k(v), \dots\}$. Escolhendo um evento elementar em particular, por exemplo v_3 , a seqüência de variáveis aleatórias gera uma seqüência numérica $\{x_{1,3}, x_{2,3}, \dots, x_{k,3}, \dots\}$. Essa seqüência numérica pode convergir ou não. A seqüência numérica convergirá para um valor $x_{L,3}$ se, escolhido de forma arbitrária um número real $\varepsilon > 0$, que pode ser feito tão pequeno quanto se queira, exista um número N para o qual:

$$|x_{n,3} - x_{L,3}| < \varepsilon$$

para todo $n > N$. Se, para todos os eventos elementares, sem nenhuma exceção, as séries numéricas geradas pelas variáveis aleatórias forem convergentes, a seqüência de variáveis aleatórias é dita convergente com certeza, que a seqüência tem convergência certa ou que a seqüência converge em todo o espaço V .

Existem, no entanto situações onde a convergência pode não ocorrer para todos os eventos elementares. Considere o exemplo, um tanto artificial, de um experimento aleatório que consiste em extrair uma carta de um baralho honesto sem os coringas, honestamente embaralhado, onde existem dois resultados: naipes vermelhos, ouros ou copas, cujo evento elementar v_1 é a cor vermelha da carta extraída, e naipes pretos, espadas ou paus, cujo evento elementar v_2 é a cor preta da carta. Nesse experimento ao conjunto de resultados naipes vermelhos se associa a probabilidade 0,5 e ao conjunto de resultados naipes pretos se associa a probabilidade 0,5.

Aos eventos elementares do conjunto naipes vermelhos se associa uma seqüência de variáveis aleatórias na forma $X_n(v_1) = s_n = 1 + 1/2 + 1/3 + \dots + 1/n$ e aos eventos elementares do conjunto naipes pretos se associa a seqüência de variáveis aleatórias na forma $X_n(v_2) = s_n = 1 - 1/2 + 1/3 - \dots + (-1)^{n-1}1/n$. No caso dos naipes vermelhos, a seqüência, que é a soma parcial da série harmônica, não converge quando n se torna indefinidamente grande, e no caso dos naipes pretos, a seqüência converge para $\ln(2)$. A probabilidade de que o resultado do experimento resulte em uma série convergente, e nesse caso no valor $\ln(2)$ é igual à probabilidade de se obter um naipe vermelho, ou seja:

$$P\{v \in V \mid \lim_{n \rightarrow \infty} s_n = \ln(2)\} = P\{v_2\} = \frac{1}{2}$$

Por outro lado, considere um segundo experimento que também consiste em extrair uma carta do mesmo baralho e definir quatro resultados: o primeiro é a carta pertencer ao naipe de paus, o segundo é a carta pertencer ao naipe de espadas, o terceiro é a carta pertencer ao naipe de copas e o quarto é carta pertencer ao naipe de ouros. Ao conjunto dos eventos elementares v_1 que constituem o primeiro resultado se associa a probabilidade 1/3, ao conjunto dos eventos elementares v_2 que constituem o segundo resultado se associa a probabilidade 1/3, o mesmo ocorrendo ao conjunto dos eventos elementares v_3 que formam o terceiro resultado. Ao conjunto de eventos elementares v_4 que formam o quarto resultado se associa a probabilidade zero.

Considere que aos eventos elementares do primeiro resultado se associe a seqüência de variáveis aleatórias $X_{1,n}(v_1) = s_{1,n} = 1 - 1/2 + 1/3 - \dots + (-1)^{n-1}1/n$, aos

eventos elementares do conjunto naipes pretos se associe a sequência de variáveis aleatórias na forma $X_{2,n}(v_2) = s_{2,n} = 1 + 1/2^2 + 1/3^2 + \cdots + 1/n^2$ e aos eventos elementares do terceiro resultado se associe a sequência de variáveis aleatórias $X_{3,n}(v_3) = s_{3,n} = 1 - 1/2^2 + 1/3^2 + \cdots + (-1)^{n-1}/n^2$. Ao quarto resultado é associada a a sequência $X_{4,n}(v_4) = s_{4,n} = 1 + 1/2 + 1/3 + \cdots + 1/n$. As três primeiras sequências convergem quando n se torna indefinidamente grande: primeira para $\ln(2)$, a segunda para $\frac{\pi^2}{6}$ e a terceira para $\frac{\pi^2}{12}$. A quarta sequência não é convergente. A probabilidade de se obter um resultado que gere uma sequência numérica convergente é igual a um, uma vez que:

$$P\{\{v_1 \in V\} \cup \{v_2 \in V\} \cup \{v_3 \in V\}\} = P\{v_1 \in V\} + P\{v_2 \in V\} + \{v_3 \in V\} =$$

$$\frac{1}{3} + \frac{1}{3} + \frac{1}{3} = 1$$

que é a probabilidade do campo de probabilidade dos resultados do experimento, que por definição é igual a um, e:

$$P\{v \in V\} = P\{v_1 \in V\} + P\{v_2 \in V\} + \{v_3 \in V\} + P\{v_4 \in V\} =$$

$$\frac{1}{3} + \frac{1}{3} + \frac{1}{3} + 0 = 1$$

A união dos três resultados com probabilidade não nula é igual, com **probabilidade 1**, ao campo de probabilidades do experimento. Lembrando do que foi definido no capítulo 2, dois conjuntos A e B são iguais, com **probabilidade 1**, quando $P(A | B) = P(B | A) = 1$, ou, equivalentemente, quando $P(A \triangle B) = 0^6$. O fato de dois conjuntos serem iguais, com **probabilidade 1**, não implica que as probabilidades de A e de B sejam iguais a um. No caso do exemplo dado, V e a união dos três resultados são iguais, com **probabilidade 1**, e a probabilidade de cada um deles é igual a um terço.

Este exemplo ajuda a interpretar a seguinte definição: se existir um subconjunto S de eventos elementares do espaço de probabilidades finito, ou infinito mas enumerável, V , para o qual a cada evento elementar $v_s \in S$ é associada uma sequência de variáveis aleatórias, convergente quando n se torna indefinidamente grande, e além disso, $P(S) = 1$:

$$P\{v \in S \subset V \mid \lim_{n \rightarrow \infty} X_n(v) = X(v)\} = P\{S \subset V\} = 1$$

então se diz que as sequências aleatórias convergem quase com certeza, têm convergência quase certa ou convergem em quase todo o espaço V . Também se pode dizer que as sequências convergem com **probabilidade 1**.

As sequências com convergência quase certa diferem das sequências com convergência certa, por que o fato da $P(S) = P(V) = 1$ não garante que S e V sejam iguais. Entre V e S pode existir uma diferença $D = V - S \neq \emptyset$ com $P(D) = 0$. Ou seja pode existir um subconjunto não vazio de V com probabilidade nula.

⁶A expressão **probabilidade 1** às vezes pode causar alguma confusão. O leitor deve rever a definição desse *tipo de igualdade entre conjuntos* sempre que se sentir desconfortável com o termo.

3.8.2 Convergência no sentido dos mínimos quadrados, convergência em probabilidade e convergência em distribuição

A sequência de variáveis aleatórias $\{X_i(v), i = 1, 2, \dots, n, \dots\}$ converge para $X(v)$ no sentido dos mínimos quadrados se:

$$\lim_{i \rightarrow \infty} E\{|X_i(v) - X(v)|^2, \text{ com } v \in V\} = 0$$

A sequência de variáveis aleatórias $\{X_i(v), i = 1, 2, \dots, n, \dots\}$ converge para $X(v)$ em probabilidade se, dado um número real e positivo ε , que pode ser arbitrariamente tão pequeno quanto se queira tem-se:

$$\lim_{i \rightarrow \infty} P\{|X_i(v) - X(v)| > \varepsilon, \text{ com } v \in V\} = 0$$

Note que se uma sequência de variáveis aleatórias $\{X_i(v), i = 1, 2, \dots, n, \dots\}$ converge no sentido dos mínimos quadrados ela também converge no sentido da probabilidade, uma vez que, a desigualdade de Chebychev estabelece que:

$$P\{|X_i(v) - X(v)| > \varepsilon, \text{ com } v \in V\} \leq \frac{E\{|X_i(v) - X(v)|^2, \text{ com } v \in V\}}{\varepsilon^2}$$

O contrário não é necessariamente verdadeiro. O mesmo acontece com a convergência quase certa, uma vez que esse tipo de convergência é estabelecido impondo a existência de um subconjunto S de V onde a probabilidade de convergência, utilizando o critério de convergência de uma série numérica, é igual a um.

Considere que uma sequência de variáveis aleatórias $\{X_i(v), i = 1, 2, \dots, n\}$ tenha uma distribuição de probabilidade F_n e que uma variável aleatória $X(v)$ tenha uma distribuição de probabilidade F . Se para todos os pontos do eixo real onde F é contínua for válido o limite:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} F_n(x) = F(x)$$

então se diz que a sequência $X_n(v)$ converge em distribuição de probabilidade para $X(v)$.

Se uma série de variáveis aleatórias converge em distribuição de probabilidade, ela converge também nos demais critérios.

3.9 Exercícios

1. $X(v)$ é uma variável aleatória com distribuição de probabilidade $F_x(x)$ e uma nova variável aleatória é definida através de $Y(v) = aX(v)^2$. Encontre a distribuição de probabilidade de $Y(v)$, considerando que a é um número real qualquer, podendo ser positivo ou negativo. Se a for positivo qual é a probabilidade de $Y(v)$ ser menor do que zero?
2. A função distribuição de probabilidade de uma variável aleatória $X(v)$ é:

$$F_X(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}e^x, & x < 0 \\ 1 - \frac{e^{-x}}{2}, & x \geq 0 \end{cases}$$

Qual é a probabilidade de que uma nova variável aleatória $Y(v)$, definida como $Y(v) = 2X(v) + 1$ seja igual ou inferior a 5 ($Y(v) \leq 5$)?

3. Uma variável aleatória $X(v)$ pode assumir qualquer valor inteiro maior do que zero. A probabilidade de que essa variável seja igual a n é $(\frac{1}{2})^n$. Considere uma nova variável $Y(v)$ definida como:

$$Y(v) = \begin{cases} 1, & \text{quando } X(v) \text{ é par} \\ -1, & \text{quando } X(v) \text{ é ímpar} \end{cases}$$

Qual é a probabilidade de que $Y(v) = -1$?

4. Considere que $Y = aX^2$ onde a é estritamente positivo. Sendo: $f_x(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-x^2)$ qual é a forma de f_y ?
5. Considere a distribuição de Laplace, cuja função densidade de probabilidade é:

$$f_X(x) = \frac{1}{2} e^{-|x|}$$

e a distribuição de Cauchy, cuja função densidade de probabilidade é:

$$f_Y(y) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{1 + y^2}$$

Encontre a função $y = g(x)$ que transforma uma variável aleatória contínua $X(v)$ com distribuição de Laplace em uma variável aleatória contínua $Y(v)$ com distribuição de Cauchy.

6. Mostre que se a densidade de probabilidade f_X de uma variável aleatória $X(v)$ for simétrica em relação a um ponto a do eixo real, então: $E(X(v)) = a$.
7. Considere uma variável aleatória $X(v)$ com densidade de probabilidade $f_X(x)$, uma função real $g(x) = ax^2$, onde a é uma constante estritamente positiva, e uma nova variável aleatória $Y(v) = g(X(v))$. Mostre que:

$$f_Y(y \mid x \geq 0) = \frac{f_X\left(\sqrt{\frac{y}{a}}\right)}{2\sqrt{ya}(1 - F_X(0))}$$

se $y \geq 0$ e:

$$f_Y = 0$$

se $y < 0$.

8. Mostre que se uma variável aleatória $X(v)$ tem a função densidade de probabilidade: $f_x(x) = 1/(\sigma\sqrt{2\pi}) \exp(-\frac{(x-\eta)^2}{2\sigma^2})$ então $E(X(v)) = \eta$ e a variância de $X(v)$ é σ^2 .

9. Demonstre a desigualdade de Chebychev:

$$\text{Se } \varepsilon > 0, \text{ então, } P\{|X(v) - \eta| \geq \varepsilon\} \leq \frac{\sigma^2}{\varepsilon^2}.$$

10. Demonstre a desigualdade de Markov :

Se $f_x(x) = 0$ para $x < 0$, então, para qualquer $\alpha > 0$, $P\{X(v) \geq \alpha\} < \frac{\eta}{\alpha}$.

11. Considere que uma variável aleatória $X(v)$ é normalmente distribuída na forma:

$$f_X(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\eta)^2}{2\sigma^2}}$$

Calcule $E(|x|)$.

12. Considere que o par ordenado de variáveis aleatórias $(X(v), Y(V))$ tem uma função distribuição de densidade conjunta $f_{X,Y}(x, y)$. Sendo $z = g(x, y)$ e $w = h(x, y)$ onde g e h são funções reais das variáveis x e y , mostre:

- (a) que o valor esperado da soma das variáveis aleatórias

$$Z(v) = g(X(v), Y(v)) \text{ e } W(v) = h(X(v), Y(v)) \text{ é:}$$

$$E(Z(v) + W(v)) = E(Z(v)) + E(W(v))$$

- (b) se $X(v)$ e $Y(v)$ são duas variáveis aleatórias quaisquer, então:

$$E(X(v) + Y(v)) = E(X(v)) + E(Y(v))$$

- (c) generalize o resultado acima para um conjunto de n variáveis aleatórias.

13. Mostre que:

- (a) Se $X(v)$ for uma variável aleatória e C for uma constante:

$$\text{var}(X(v) + C) = \text{var}(X(v))$$

e:

$$\text{var}(C X(v)) = C^2 \text{var}(X(v))$$

- (b) Considere que o par ordenado de variáveis aleatórias $(X(v), Y(V))$ tem uma função distribuição de densidade conjunta $f_{X,Y}(x, y)$. Mostre que, se $X(v)$ e $Y(v)$ forem independentes, então:

$$\text{var}(X(v) + Y(v)) = \text{var}(X(v)) + \text{var}(Y(v))$$

14. Dadas duas variáveis aleatórias $X(v)$ e $Y(v)$ calcule:

(a) $F_{X,Y}(x, y \mid x_1 < X(v) \leq x_2)$

(b) $f_{X,Y}(x, y \mid x_1 < X(v) \leq x_2)$

(c) $f_Y(x, y \mid x_1 < X(v) \leq x_2)$

- (d) fazendo $x_1 = x$ e $x_2 = x + \Delta x$, com Δx pequeno, e tomando o limite em que $\Delta x \rightarrow 0$ mostre que:

$$f_Y(y \mid X(v) = x) = \frac{f_{X,Y}(x, y)}{f_X(x)}$$

Observação: o resultado acima pode ser generalizado para um conjunto de n variáveis aleatórias $X_1(v), X_2(v), \dots, X_{n-1}(n-1), X_n(v)$ para gerar uma regra de cadeia com a forma:

$$\begin{aligned} f_{X_1, X_2, \dots, X_n}(x_1, x_2, x_n) = & \\ & f_{X_n}(x_n \mid X_{n-1} = x_{n-1}, X_{n-2} = x_{n-2}, \dots, X_1 = x_1) \\ & \times f_{X_{n-1}}(x_{n-1} \mid X_{n-2} = x_{n-2}, X_{n-3} = x_{n-3}, \dots, X_1 = x_1) \\ & \times f_{X_{n-2}}(x_{n-2} \mid X_{n-3} = x_{n-3}, X_{n-4} = x_{n-4}, \dots, X_1 = x_1) \\ & \vdots \\ & \times f_{X_3}(x_3 \mid X_2 = x_2, X_1 = x_1) \\ & \times f_{X_2}(x_2 \mid X_1 = x_1) \\ & \times f_{X_1}(x_1) \end{aligned}$$

15. Escreva uma rotina de computador para calcular a correlação entre dois vetores aleatórios com n dimensões.

3.10 Apêndice. Domínios e regiões

O termo geral ‘conjunto de pontos’ pertencentes ao plano $\mathbb{R} \times \mathbb{R}$ é utilizado para indicar qualquer coleção, finita ou não de pontos desse plano. O conjunto:

$$\{(0, 7) (3, 9) (5, -7) (-3, 0)\}$$

é um conjunto finito de pontos em \mathbb{R}^2 . A reta $x_1 + x_2 = 5$ e a elipse $x_1^2/4 + x_2^2/9 = 1$ são conjuntos infinitos de pontos em \mathbb{R}^2 , assim como $\{(x_1, x_2) \mid x_1 \leq 5 \text{ e } x_2 \leq -7\}$.

Define-se vizinhança de um ponto (x_{1_1}, x_{2_1}) como sendo o conjunto de pontos contidos no círculo:

$$(x_1 - x_{1_1})^2 + (x_2 - x_{2_1})^2 < \delta^2$$

Um conjunto de pontos é chamado de conjunto aberto se, para todo e qualquer um dos seus elementos for possível definir uma vizinhança que esteja totalmente contida nesse conjunto. Por exemplo, o conjunto $\{(x_1 - 5)^2 + (x_2 - 4)^2 < 7\}$ é um conjunto aberto. O retângulo $\{(x_1, x_2) \mid -2 < x_1 < 5 \text{ e } 7 < x_2 < 19\}$ é outro exemplo de conjunto aberto. A característica comum a todos os conjuntos abertos é que para todos os seus membros é possível encontrar um raio δ , não importa o quanto pequeno ele seja, para que a desigualdade (3.84) seja satisfeita.

Um conjunto E de pontos é chamado de conjunto fechado se os pontos que não pertençam a E , ou seja para os pontos de $\bar{E} = \mathbb{R}^2 - E$ formarem um conjunto aberto. Por exemplo, os conjuntos:

$$\{(x_1, x_2) \mid x_1^2 + x_2^2 \geq 1\}$$

$$\{(x_1, x_2) \mid x_1^2 + x_2^2 \leq 1\}$$

e:

$$\{(x_1, x_2) \mid x_1^2 + x_2^2 = 1\}$$

são conjuntos fechados, já que os conjuntos:

$$\{(x_1, x_2) \mid x_1^2 + x_2^2 < 1\}$$

$$\{(x_1, x_2) \mid x_1^2 + x_2^2 > 1\}$$

e:

$$\{(x_1, x_2) \mid x_1^2 + x_2^2 < 1 \text{ ou } (x_1, x_2) \mid x_1^2 + x_2^2 > 1\}$$

são conjuntos abertos.

Fronteira de um conjunto é um ponto tal que qualquer vizinhança sua contém pelo menos um ponto do conjunto e pelo menos um ponto que não pertença ao conjunto. Os conjunto abertos não incluem os pontos de fronteira. Os conjuntos fechados incluem os pontos de fronteira.

O motivo para se introduzir o conceito de vizinhança de um ponto e distinguir de forma clara conjuntos abertos e conjuntos fechados é permitir a definição de várias operações do cálculo em duas ou mais dimensões. Por exemplo, a definição de derivada parcial em um ponto (x_1, x_2) envolve a realização de um processo de limite em uma vizinhança de (x_1, x_2) .

Um arco contínuo no plano real é definido como o conjunto de pontos (x_1, x_2) tais que:

$$x_1 = \phi(t) \text{ e } x_2 = \psi(t) \quad (3.10.22)$$

onde ϕ e ψ são funções contínuas do parâmetro t . Quando nenhum par de valores distintos de t coincide em um mesmo ponto, o arco recebe o nome de arco de Jordan (figura 3.6 a). Uma curva é chamada de curva fechada simples quando existe um único ponto do plano \mathbb{R}^2 para o qual, dados dois valores distintos a e b do parâmetro t , tem-se $\phi(a) = \phi(b) = x_1$ e $\psi(a) = \psi(b) = x_2$, com (x_1, x_2) dados pela equação 3.10.22 (figura 3.6 b). A circunferência $x_1 = r\cos(t)$ e $x_2 = r\sin(t)$ com $0 \leq t \leq 2\pi$ é um exemplo de curva fechada simples. Note que o domínio das funções reais ϕ e ψ foi discriminado.

Um conjunto é chamado de conjunto aberto conexo, ou de um domínio, se dois pontos quaisquer desse conjunto podem ser unidos por uma linha poligonal formada apenas por pontos pertencentes ao conjunto (figura 3.7 a). Por exemplo, a união de dois conjuntos abertos e disjuntos não forma um domínio. Um domínio é chamado de simplesmente conexo, se qualquer curva fechada simples traçada sobre esse domínio contiver, no seu interior, apenas pontos do domínio (figura 3.7 b). Uma segunda forma de definir um domínio simplesmente conexo é exigir que qualquer curva simples traçada no seu interior possa ser continuamente deformada mantendo todos os seus pontos no domínio. Um domínio multiplamente conexo é um domínio conexo que não respeita a definição de domínio simplesmente conexo.

Regiões são definidas como a união de domínios com um subconjunto dos pontos da sua fronteira. Uma região fechada é união do domínio com todos os pontos de sua fronteira, enquanto que uma região aberta é o próprio domínio.

O conceito de domínios e regiões podem ser diretamente estendidos para espaços com N dimensões.

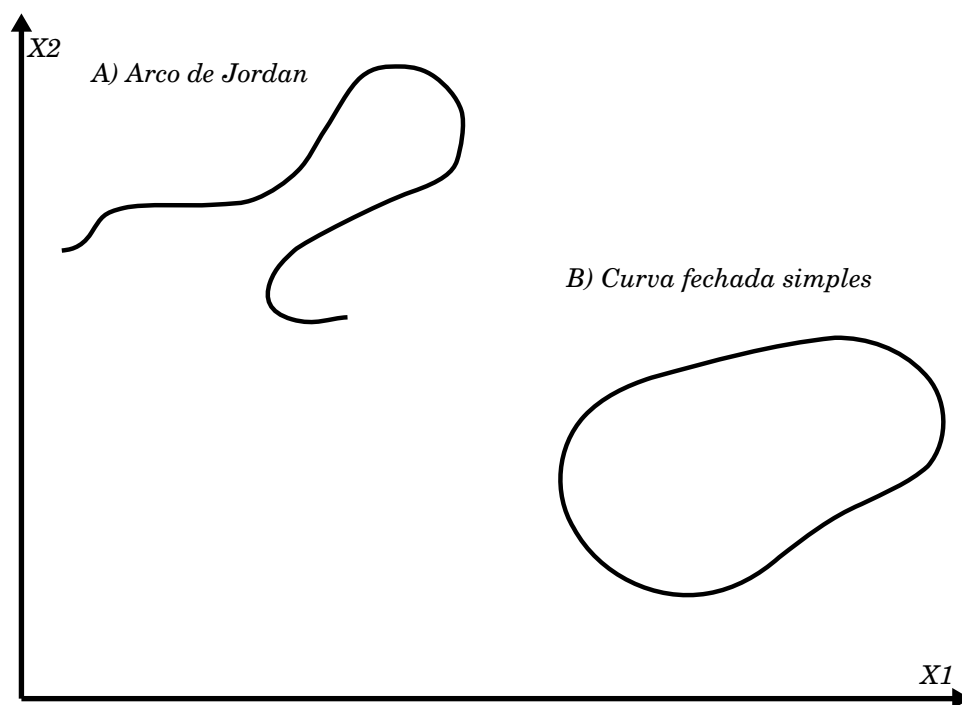


Figura 3.6: Curva ou arco de Jordan (a); curva fechada simples (b)

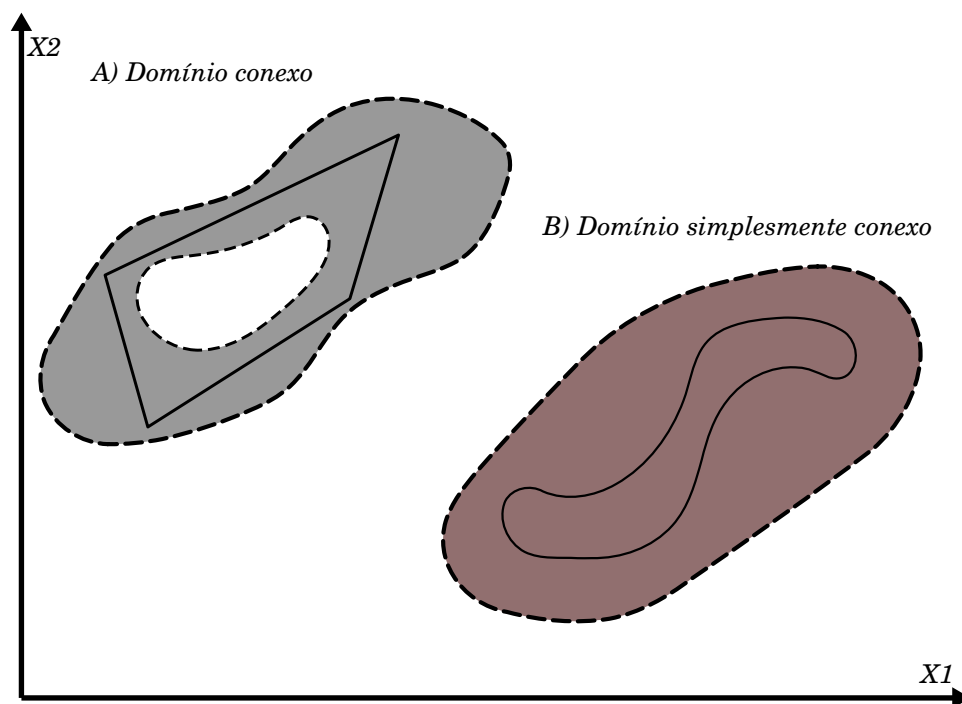


Figura 3.7: Domínio ou conjunto aberto conexo (a); domínio simplesmente conexo (b)

Capítulo 4

Geração de números aleatórios

Existem muitas formas de se gerar números pseudo aleatórios. No que segue serão apresentadas algumas das formas mais populares de produzir esse tipo de número. Três métodos para a produção de números pseudo aleatórios com distribuição uniforme são discutidos inicialmente. Dois algoritmos são discutidos em maior detalhe e é feita uma discussão sobre os diferentes testes que podem ser aplicados para verificar a qualidade e as limitações desses algoritmos na geração de sequências pseudo aleatórias. O terceiro algoritmo, conhecido como algoritmo de Fibonacci, é brevemente discutido. Como foi visto em capítulos anteriores, a distribuição uniforme pode ser utilizada, fazendo-se uma mudança adequada de variáveis, para gerar sequências de números definidas por funções de distribuição com caráter muito geral. Além da técnica de mudança de variáveis, os métodos da inversão e da rejeição de von Neumann para a geração de sequências aleatórias com distribuições não uniformes são discutidos.

É importante ter em conta que, por melhor que seja o procedimento para criar números pseudo aleatórios, eles serão sempre pseudo aleatórios. Eles podem ser utilizados para enganar pessoas, ou esconder coisas de pessoas, mas não podem ser usados para enganar a natureza. Isso significa que o uso de números pseudo aleatórios na matemática e nas ciências naturais requer um cuidado extremo.

4.1 Números pseudoaleatórios - fórmula de congruência de Lehmer

Considere a sequência infinita e enumerável x_i , com $i = 1, 2, \dots$ definida como:

$$x_i = \text{resto da divisão de } ax_{i-1} + c \text{ por } m \quad (4.1.1)$$

onde x_0 , a , c e m são números inteiros positivos escolhidos previamente sendo a única restrição imposta que x_0 , a e c sejam inferiores a m . A expressão 4.1.1 é normalmente representada na literatura como:

$$x_i = ax_{i-1} + c \pmod{m} \quad (4.1.2)$$

Observe que a notação pode causar alguma confusão por causa da palavra ‘módulo’.

A sequência 4.1.2 é limitada aos valores $0, 1, 2, 3, 4, \dots, m-1$ que são os restos possíveis da divisão de um número inteiro positivo por m também inteiro positivo. Além disso, uma vez definido um x_l particular, os outros membros da sequência estão definidos pela fórmula 4.1.2. Como o número de valores possíveis é limitado, é de se esperar que algum x_k com k maior que l repita o valor de x_l . Considere a seguinte situação. Suponha que um x_0 seja escolhido e se obtenha a sequência:

$$\begin{aligned}
 & x_0 \\
 x_1 &= \text{resto da divisão de } ax_0 + c \text{ por } m \\
 x_2 &= \text{resto da divisão de } ax_1 + c \text{ por } m, \text{ sendo } x_2 \neq x_1 \\
 x_3 &= \text{resto da divisão de } ax_2 + c \text{ por } m, \text{ sendo } x_3 \neq x_1 \text{ e } \neq x_2 \\
 & \vdots \\
 & \vdots \\
 & \vdots \\
 x_{m-2} &= \text{resto da divisão de } ax_{m-3} + c \text{ por } m, \text{ sendo} \\
 & x_{m-2} \neq \text{ de todos outros } x_i, i < m-2 \\
 x_{m-1} &= \text{resto da divisão de } ax_{m-2} + c \text{ por } m, \text{ sendo} \\
 & x_{m-1} \neq \text{ de todos outros } x_i, i < m-1
 \end{aligned}$$

O próximo resultado é, necessariamente, um dos x_i anteriores, com $i = 0, 1, 2, \dots, m-1$. Supondo que x_m seja igual a x_l , com l entre zero e $m-1$:

$$\begin{aligned}
 x_m &= x_l \\
 x_{m+1} &= x_{l+1} \\
 & \vdots \\
 & \vdots \\
 & \vdots \\
 x_{m+(m-l)} &= x_m \\
 & \vdots \\
 & \vdots \\
 & \vdots \\
 x_{m+(m-l)+(m-l)} &= x_{m+(m-l)} \\
 & \vdots \\
 & \vdots \\
 & \vdots
 \end{aligned}$$

ou seja, a partir de x_l , os membros da sequência se repetem com periodicidade $m-l$. No entanto, como a relação entre x_{l-1} e x_l é bijetora, ou seja, dado x_{l-1} um único valor de x_l é obtido e a partir de x_l a operação inversa leva obrigatoriamente a x_{l-1} , a sequência toda é periódica. Isso significa que, depois dos m valores distintos, o próximo membro da sequência é igual ao primeiro membro. Se tivesse corrido de um dos x_i repetir um valor anterior antes de se obter m valores anteriores distintos, o resultado continuaria sendo uma sequência periódica, mas com um período menor. A periodicidade é no máximo, m (ver a demonstração desse resultado em [20]).

A sequência obtida não tem nada de aleatória. Ela é perfeitamente determinada pela escolha dos parâmetros a , c , m e x_0 . Pode-se estabelecer a condição para que o período seja igual a m . O que acontece é que se o período for suficientemente longo, onde longo depende da aplicação, a sequência se comporta como aleatória,

quando a ela se aplicam alguns testes estatísticos. Por essa razão, a sequência gerada pela equação 4.1.2 pertence a uma classe de sequências conhecidas como sequências pseudoaleatórias. A sequência 4.1.2 foi proposta por D. H. Lehmer em 1951 e expressões como a 4.1.2 são chamadas de relações de congruência.

Um exemplo de como verificar se a sequência fornecida pela equação 4.1.2 com os parâmetros:

$$\begin{aligned} a &= 3^{17} \\ c &= 2^{22} \\ m &= 2^{29} \\ x_0 &= 2^{14} \end{aligned} \quad (4.1.3)$$

se aproxima de uma distribuição uniforme, é gerar um número grande de valores, no exemplo a ser discutido foram 5000 (figura 4.1), normalizar esses valores dividindo-os por m e calcular, por exemplo, o seu valor médio, a sua variância e a sua assimetria¹. Os valores que foram obtidos foram:

$$\begin{aligned} \bar{x} &= 0,50 \\ var(x_i) &= 0,084 \\ assimetria &= -0,014 \end{aligned}$$

Os valores exatos para uma distribuição unitária no intervalo $(0, 1]$ são 0,5, 0,833333... (dízima periódica) e zero, o que significa se a verificação se limitar ao cálculo desses três valores, a sequência pode ser considerada, em primeira aproximação, como uniformemente distribuída.

Uma segunda verificação que pode ser feita consiste em gerar uma sequência longa de valores $\{y_i = x_i/m, i = 1, 2, \dots, I\}$, sendo I um número inteiro positivo e grande, onde os x_i são dados pela equação 4.1.2, dividir o intervalo $(0, 1]$ em um número N de subintervalos com o mesmo comprimento e contar quantos valores de y_i caem em cada subintervalo. Como se imagina, a princípio, que a equação 4.1.2 gera uma sequência que pode ser confundida com uma variável aleatória uniformemente distribuída em $(0, 1]$, é de se esperar que o número de valores n_j , com $j = 1, 2, \dots, N$, contido em cada um dos intervalos seja igual ao número total de membros da sequência I dividido por N .

Na realidade, os valores devem variar e a forma mais simples de verificar se essas variações são flutuações aceitáveis em torno do valor esperado é calcular a variável aleatória χ^2_ν de Pearson, definida como :

$$\chi^2_\nu = \sum_{j=1}^N \frac{(n_j - \frac{I}{N})^2}{\frac{I}{N}}$$

onde ν é o chamado número de graus de liberdade envolvidos na verificação. O número de graus de liberdade em um teste estatístico é definido como o número de dados a serem submetidos ao teste, menos o número de vínculos estabelecidos entre os dados, definidos ou calculados a partir do próprio conjunto de dados, necessários para se aplicar o teste. Neste caso, o número de dados é o número de subintervalos do intervalo $(0, 1]$. Entre esses dados existe apenas um vínculo dado pela razão I/N e, portanto, o número de graus de liberdade é igual a $N - 1$.

A variável χ^2_ν de Pearson fornece uma indicação da sequência $\{y_i\}$ se afastar ou não de valores extraídos de uma distribuição uniforme. Não existe forma objetiva

¹Assimetria é o momento de ordem 3 de uma distribuição de probabilidade.

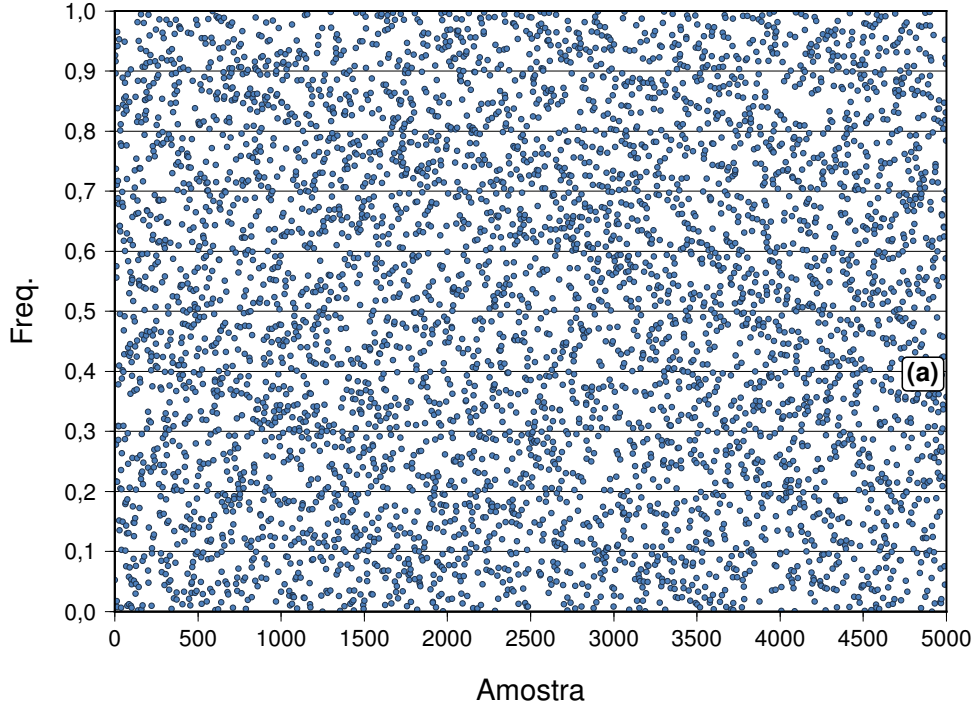


Figura 4.1: Distribuição dos 5000 valores gerados pela fórmula de congruência 4.1.2, com os valores definidos em 4.1.3 e normalizados pelo valor de $m = 2^{29}$. Note que o diagrama apresenta alguns alinhamentos como os dois, que parecem os mais evidentes, com extremidade perto da letra a marcada no diagrama. Note o espaçamento regular entre os pontos.

de se determinar qual valor da variável χ_ν^2 de Pearson a partir do qual se pode dizer que a sequência $\{y_i\}$ é, ou não é, extraída de uma distribuição uniforme.

O procedimento usual é se realizar um teste de hipótese, que consiste em assumir que a sequência foi extraída de uma distribuição uniforme e considerar a probabilidade de que o valor da variável χ_ν^2 de Pearson calculada para essa sequência assumira um valor diferente de zero.

Pode-se demonstrar que a variável χ_ν^2 de Pearson se distribui como a variável aleatória χ_ν^2 definida por:

$$F(x) = P\{\chi_\nu^2 \leq x\} = \frac{1}{2^{(\frac{\nu}{2})}\Gamma\left(\frac{\nu}{2}\right)} \int_0^x \xi^{(\frac{\nu-2}{2})} \exp\left(-\frac{\xi}{2}\right) d\xi \quad x \geq 0 \quad (4.1.4)$$

A distribuição F é positiva para x positivo. Na equação 4.1.4, Γ é a função gama definida como:

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty \xi^{x-1} \exp(-\xi) d\xi$$

sendo x real estritamente positivo.

A função Γ satisfaz a fórmula de recorrência:

$$\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$$

o que permite estender o seu domínio para incluir os números reais negativos e não inteiros. Se x for um número inteiro positivo:

$$\Gamma(n+1) = n!$$

o que permite definir:

$$\Gamma(1) = \Gamma(0+1) = 0! = 1$$

No teste, se faz a afirmação, conhecida em estatística como hipótese nula, de que a sequência $\{y_i\}$ é uma extração de uma variável aleatória com distribuição uniforme e se estabelece uma probabilidade máxima de se cometer um erro quando se rejeita essa afirmação. Quem estabelece essa probabilidade é quem está fazendo o experimento numérico com base nas características do experimento e nos seus objetivos. O teste de hipótese consiste em fixar um valor de x_c de forma que a probabilidade de que a variável χ^2_ν de Pearson seja maior do que esse valor é:

$$\alpha = 1 - F(x_c) \quad (4.1.5)$$

O parâmetro α recebe o nome de nível de significância e o seu valor deve, em princípio, ser escolhido pequeno.

Usando o valor calculado do χ^2_ν encontra-se o valor correspondente de x para que $F(x) = P\{\chi^2_\nu \leq x\}$. Se x for superior a x_c dado pela equação 4.1.5, a hipótese nula é rejeitada, ou seja, se considera que $\{y_i\}$ não é uma extração de uma variável aleatória com distribuição uniforme. A hipótese é rejeitada porque a probabilidade de que a variável χ^2_ν de Pearson de uma extração de uma distribuição uniforme superar o valor x_c é no máximo igual a α .

Se x for inferior a x_c dado pela equação 4.1.5, a hipótese nula não é rejeitada. É importante perceber que rejeitar a hipótese nula tem um significado muito mais forte do que não rejeitar. Quando se rejeita a hipótese nula a probabilidade de errar, ou seja, considerar que a sequência não é uma extração de uma distribuição uniforme quando ela é de fato, é perfeitamente estabelecida como sendo igual a α .

O teste, por outro lado, não estabelece a probabilidade de erro para a decisão de não rejeitar a hipótese nula. O máximo que se pode dizer nesse caso é que não há evidência de que a sequência tenha sido extraída de um processo aleatório caracterizado por uma distribuição diferente da distribuição uniforme.

O teste da variável χ^2_ν de Pearson foi aplicado aos 5000 valores individuais da sequência gerada pela equação 4.1.2 com os valores definidos na equação 4.1.3. O intervalo $(0, 1]$ foi dividido em 25 subintervalos com comprimento 0,04. O valor esperado em uma distribuição uniforme para cada intervalo é 200 e o número de graus de liberdade é 24. A variável χ^2_ν de Pearson calculada foi de 7,49. Considerando um nível de significância de 0,05, o valor crítico de rejeição x_c é 39,4. Isso significa que a hipótese nula não foi rejeitada.

A combinação dos dois resultados obtidos, média e variância amostrais muito próximas dos valores correspondentes de uma distribuição uniforme e a rejeição da hipótese nula sugerem que os 5000 valores da sequência calculada seja uma extração de uma variável aleatória com distribuição uniforme.

Outro teste que pode ser feito é verificar se a sequência é periódica e qual é o período. Na realidade, foi demonstrado que a sequência é periódica, o período não é determinado, mas o seu valor máximo é m . Em uma sequência com poucos valores em relação ao valor de m , pode ser que não seja possível determinar o seu período. A forma mais simples de se verificar se os valores calculados da sequência cobrem

pelo menos um período da sequência é comparar o valor inicial com todos os valores seguintes. A repetição do valor, neste caso particular, indicaria definitivamente que a sequência é periódica. No caso do exemplo apresentado, onde m é igual a 2^{29} , ou, 536.870.912 e a sequência utilizada tem 5000 valores, não foi possível identificar o período.

A conclusão até aqui é, embora na realidade a sequência calculada não seja uma sequência de uma variável aleatória, os testes feitos não permitem perceber isso. No entanto, uma inspeção mais atenta da figura 4.1 mostra a existência de alinhamentos de alguns valores da sequência, algo difícil de acontecer em uma sequência verdadeiramente aleatória. Um teste adicional que pode ser feito consiste em verificar se a sequência apresenta autocorrelação significativa.

Para verificar a possibilidade de autocorrelação entre os termos da sequência pseudoaleatória contendo os elementos $\{e_i, \text{ sendo } i = 1, 2, \dots, 2I\}$, o segmento contendo os primeiros I elementos pode ser comparado com os I segmentos que podem ser formados, deslocando-se a posição de início desses segmentos em relação ao primeiro segmento e mantendo-se o número de elementos fixos em I . Isso significa que o primeiro segmento:

$$S_1 : \{e_1, e_2, \dots, e_I\}$$

é comparado, sucessivamente, com os elementos dos segmentos:

$$\begin{aligned} S_1 &: \{e_1, e_2, \dots, e_I\} \\ S_2 &: \{e_2, e_3, \dots, e_{I+1}\} \\ S_3 &: \{e_3, e_4, \dots, e_{I+2}\} \\ S_4 &: \{e_4, e_5, \dots, e_{I+3}\} \\ &\vdots \\ &\vdots \\ &\vdots \\ S_I &: \{e_I, e_{I+1}, \dots, e_{2I-1}\} \\ S_{I+1} &: \{e_{I+1}, e_{I+2}, \dots, e_{2I}\} \end{aligned}$$

formando um conjunto de $I+1$ valores r_L , com $\{L = 0, 1, 2, \dots, I\}$. A comparação entre os segmentos S_1 e S_L é feita calculando-se o coeficiente de correlação linear r_L , ou coeficiente de correlação de Pearson, definido como:

$$r_L = \sum_{i=1}^I \frac{(e_i - \bar{e}_{1,L})(e_{i+L} - \bar{e}_{L+1,L+I})}{\sqrt{(e_i - \bar{e}_{1,L})^2} \sqrt{(e_{i+L} - \bar{e}_{L+1,L+I})^2}}$$

onde $\bar{e}_{1,L}$ é o valor médio do primeiro segmento S_1 e $\bar{e}_{L+1,L+I}$ é o valor médio do segmento S_{L+1} . O valor de r_L é limitado ao intervalo $[-1, 1]$. O valor correspondente a L igual a zero corresponde à correlação de S_1 com S_1 e é sempre igual a um.

A figura 4.2 apresenta os coeficientes r_L em função L para a segmentos separados da sequência correspondente à figura 4.1. Diagramas desse tipo mostram como o valor do coeficiente de correlação entre S_1 e S_L variam à medida que o deslocamento L aumenta e são chamados de diagramas de correlação cruzada entre os dois segmentos. Como os segmentos são extraídos de uma mesma sequência, o coeficiente r_L são algumas vezes chamados de coeficientes de autocorrelação da sequência completa e o diagrama é chamado de autocorrelação. O diagrama de autocorrelação da figura 4.2 se estende até 2500 deslocamentos, uma vez que a sequência tem 5000 valores.

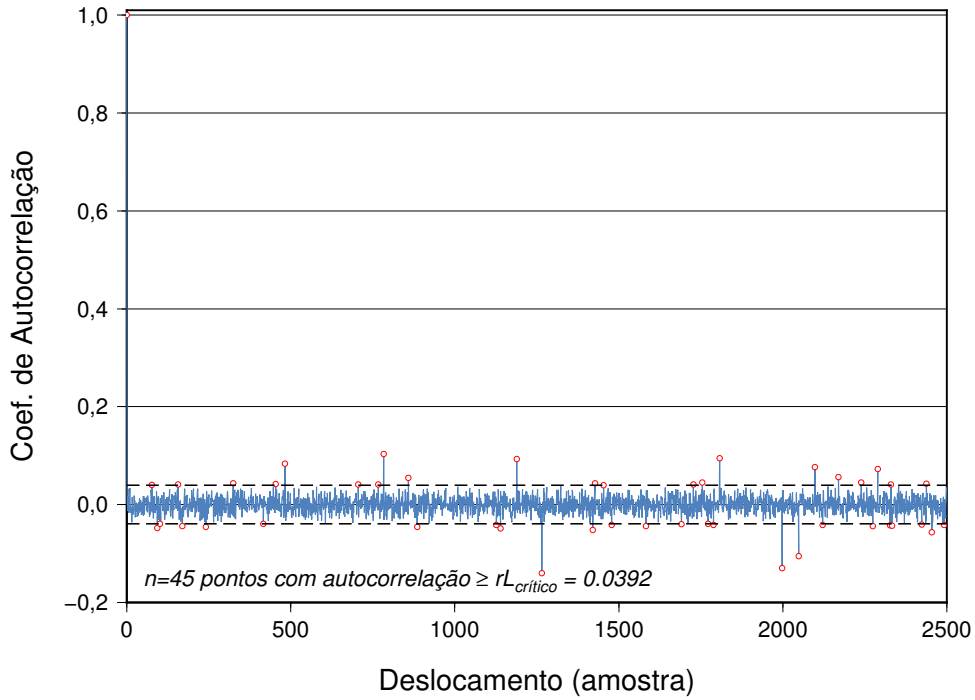


Figura 4.2: Diagrama de autocorrelação da sequência pseudoaleatória apresentada na figura 4.1. As linhas tracejadas correspondem ao coeficiente de correlação crítico $r_{L_{crítico}}$ para a rejeição da hipótese nula de que os valores de correlação tenham sido extraídos de uma população com correlação nula. O nível de significância adotado foi de 0,05, distribuído simetricamente para valores negativos e positivos e $|r_{L_{crítico}}| = 0,0392$. Em 45 valores do deslocamento L o módulo do coeficiente de correlação foi superior a $r_{L_{crítico}}$.

O coeficiente r_L é, ele mesmo, uma variável aleatória e tem uma distribuição de probabilidade própria. A verificação se sequência apresenta autocorrelação significativa é feita fazendo-se um teste de hipótese, onde a hipótese nula é que os diferentes r_L são extrações de uma população com coeficiente de autocorrelação igual a zero.

Apesar da variável r_L ter uma distribuição própria, para se verificar se I valores de r_L são extrações ao acaso de uma população caracterizada por r igual a zero, é conveniente definir uma nova variável aleatória z , conhecida como variável z de Fisher :

$$z = \frac{1}{2} \ln \frac{1 + r_L}{1 - r_L} \quad \text{com} \quad -\infty < z < \infty \quad \text{e} \quad -1 \leq r_L \leq 1$$

Quando r_L é igual a zero e quando I é igual ou superior a 10, a variável z pode ser considerada como sendo normalmente distribuída em torno de um valor médio igual a zero e com variância igual a:

$$var(z) = \frac{1}{I - 3}$$

Isso significa que:

$$T(r_L) = \sqrt{\frac{I-3}{2}} \ln \frac{1+r_L}{1-r_L} \quad (4.1.6)$$

pode ser considerada como tendo a distribuição de probabilidade igual à da distribuição de Gauss normalizada ($\bar{x} = 0$ e $var(x) = 1$):

$$F(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) d\xi$$

Considerando como hipótese nula que r_L é igual a zero e fixando um valor α , pequeno e contido no intervalo $[0, 1]$, como índice de significância, fica determinado o número real e positivo c tal que:

$$F(T(r_L) = -c) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{-c} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) d\xi = \frac{\alpha}{2}$$

Uma vez que a densidade de probabilidade de f da distribuição normal é uma função simétrica em relação a zero:

$$F(T(r_L) = c) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^c \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) d\xi = 1 - \frac{\alpha}{2}$$

Isso significa que, se $|T(r_L)| > c$ a probabilidade de se obter esse valor de $T(r_L)$ a partir de uma amostra extraída de uma população com r_L nulo é menor do que α . A hipótese nula pode então ser rejeitada, considerando que o erro máximo que pode ser cometido ao se tomar essa decisão é igual a α .

Da equação 4.1.6 tem-se que, a hipótese nula é rejeitada, com um nível de significância α , quando:

$$\begin{aligned} \ln \frac{1+r_L}{1-r_L} &> \frac{2c}{\sqrt{I-3}} = \beta \\ &\text{ou} \\ \ln \frac{1+r_L}{1-r_L} &< \frac{-2c}{\sqrt{I-3}} = -\beta \end{aligned} \quad (4.1.7)$$

É importante lembrar que o valor c é fixado pelo nível de significância α . A equação 4.1.7 leva a conclusão que a hipótese nula é rejeitada quando:

$$\begin{aligned} r_L > r_{L_{\text{crítico}}} &= \frac{e^\beta - 1}{e^\beta + 1} = \tanh^{-1}\left(\frac{\beta}{2}\right) \\ &\text{ou} \\ r_L < -r_{L_{\text{crítico}}} &= \frac{e^{-\beta} - 1}{e^{-\beta} + 1} = -\tanh^{-1}\left(\frac{\beta}{2}\right) \end{aligned}$$

onde \tanh^{-1} representa a função inversa de \tanh .

No caso do diagrama de autocorrelação apresentado na figura 4.2, o nível de significância escolhido foi de 0,05, simetricamente dividido para valores negativos e positivos. O valor crítico para a rejeição da hipótese nula de que um determinado valor particular do coeficiente de correlação de Pearson seja extraído de uma população com coeficiente de correlação nulo foi calculado em 0,0392.

Em 45 valores do deslocamento L o módulo do coeficiente de correlação foi superior ao valor de $r_{L_{\text{crítico}}}$. O teste de rejeição foi repetido 2500 vezes, com um nível de significância de 0,05, o que permite esperar, no caso de ausência de correlação, um número máximo de 125 valores com módulo maior do que 0,0392. Isso significa

que, sob esse ponto de vista, a sequência aleatória não apresenta autocorrelação. Existem, no entanto, valores visivelmente altos em relação à maioria dos valores de correlação para deslocamentos maiores do que zero. A combinação deste resultado com o aspecto da figura 4.1 sugere que talvez seja conveniente procurar uma nova sequência pseudoaleatória.

4.2 Números pseudoaleatórios - algoritmo de Bays e Durham

O algoritmo utilizado para gerar a série pseudoaleatória apresentado na figura 4.1 é muito utilizado devido à sua simplicidade de programação. No entanto, existe uma série de restrições ao uso desse algoritmo (ver, por exemplo, [25]). Uma das restrições é que a fórmula 4.1.2 fornece resultados que não são livres de correlação sequencial entre valores sucessivos. Uma forma de aprimorar a geração de uma sequência pseudoaleatória é utilizar o algoritmo proposto por Bays e Durham.

Em termos simples, o algoritmo de Bays e Durham gera inicialmente um vetor $V(j)$ com dimensão L , onde os valores de cada componente são obtidos por uma fórmula de congruência como a expressão 4.1.2. Press et al.[25] utilizam L igual a 97 e chamam a atenção que o valor exato não é importante. Em seguida a própria relação de congruência é utilizada para gerar de forma pseudoaleatória um número j tal que, $1 \leq j \leq L$. O valor armazenado na componente j do vetor é utilizado como um membro da sequência pseudoaleatória que se deseja formar, e a componente j é imediatamente substituída por outro número pseudoaleatório gerado pela relação de congruência. Com isso se gera uma sequência pseudoaleatória livre, ou quase livre, de correlação sequencial.

Utilizando a fórmula de congruência 4.1.2) com os valores definidos na equação 4.1.3 e uma rotina baseada no algoritmo de Bays e Durham, foi gerada uma sequência pseudoaleatória com 5000 elementos, cuja distribuição é apresentada na figura 4.3. Nesse exemplo, o vetor auxiliar $V(j)$ tem 100 componentes. O valor médio dessa sequência foi de 0,50, a variância é 0,083, muito semelhantes ao resultado correspondente à figura 4.1. A assimetria é nesse caso 0,015. O teste da variável χ^2_{24} de Pearson foi de 9,39. Compare a figura 4.1 com a figura 4.3. A maioria dos alinhamentos observados na figura 4.1 foi eliminada.

A figura 4.4 apresenta o diagrama de autocorrelação correspondente à figura 4.3. Em 131 valores do deslocamento L o módulo do coeficiente de correlação foi superior ao valor de $r_{L_{critico}}$. Como o número máximo esperado de valores com módulo maior do que 0,0392 é 125, a série produzida apresenta evidência clara de autocorrelação. No entanto, não há valores do coeficiente de correlação para deslocamentos maiores do que zero que se destaquem no conjunto geral.

Convém, neste momento investigar a influência dos parâmetros utilizados no cálculo da relação de congruência definidos na equação 4.1.3. A figura 4.4 apresenta o diagrama de autocorrelação de uma sequência pseudoaleatória gerada pelo algoritmo de Bays e Durham, mudando-se os parâmetros da relação de congruência para:

$$\begin{aligned} a &= 3^{17} \\ c &= 0 \\ m &= 2^{29} \\ x_0 &= 2^{14} \end{aligned} \tag{4.2.8}$$

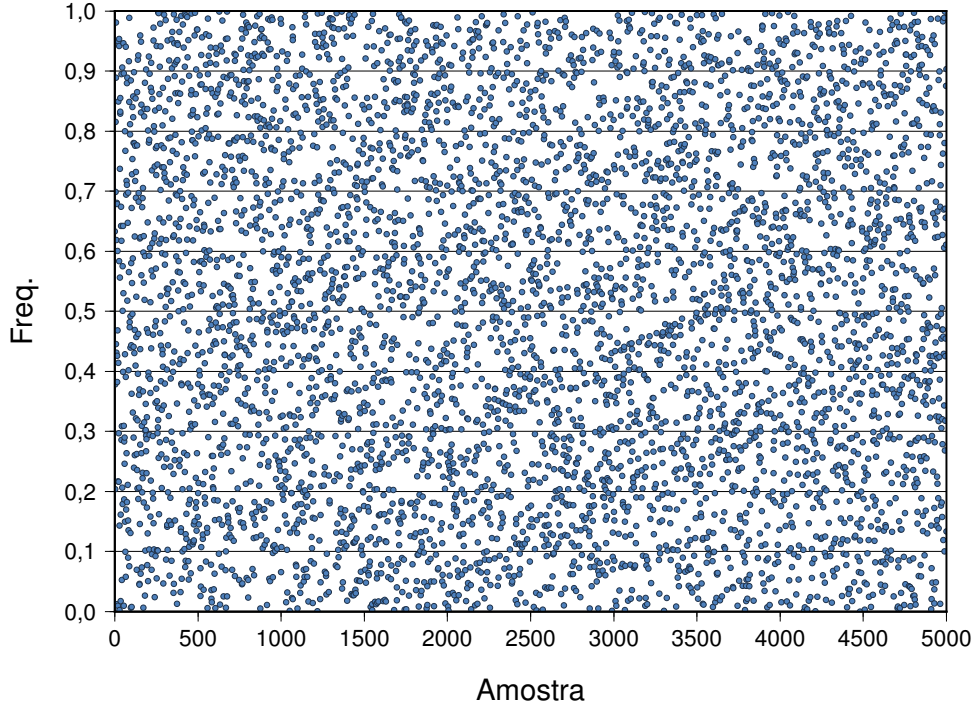


Figura 4.3: Distribuição dos 5000 valores gerados pelo algoritmo de Bays e Durham aplicado sobre os resultados fornecidos pela fórmula de congruência 4.1.2, com os valores definidos na equação 4.1.3 e normalizados pelo valor de $m = 2^{29}$. O vetor auxiliar tem 100 componentes. Note que a maioria dos alinhamentos observados na figura 4.1 foi eliminada.

Nesse ensaio, o vetor auxiliar $V(j)$ também tem 100 componentes. O valor médio dessa sequência foi de 0,50, a variância é 0,082, muito semelhantes aos resultados anteriores e a assimetria é nesse caso -0,018. O teste da variável χ^2_{24} de Pearson foi de 14,43. É importante notar que o valor obtido do χ^2_{24} de Pearson é ainda inferior ao valor de 39,4 do valor crítico para a rejeição da hipótese nula.

A figura 4.5 apresenta o diagrama de autocorrelação correspondente a esse ensaio. Em 125 valores do deslocamento L o módulo do coeficiente de correlação foi superior ao valor de $r_{L_{crítico}}$. Como o número máximo esperado de valores com módulo maior do que 0,0392 é 125, a série produzida não apresenta evidência de autocorrelação. Não há também neste caso valores do coeficiente de correlação para deslocamentos maiores do que zero que se destaquem no conjunto geral.

Em outro ensaio de geração de sequência pseudoaleatória utilizando o algoritmo de Bays e Durham foram utilizados como parâmetros da relação de congruência:

$$\begin{aligned} a &= 3^{17} \\ c &= 0 \\ m &= 2^{30} \\ x_0 &= 2^{14} \end{aligned} \quad (4.2.9)$$

A figura 4.6 apresenta a distribuição dos 5000 elementos gerados pelo algoritmo de Bays e Durham usando os parâmetros definidos na equação 4.2.9. O vetor auxiliar $V(j)$ tem 100 componentes. O valor médio dessa sequência é de 0,50, a variância

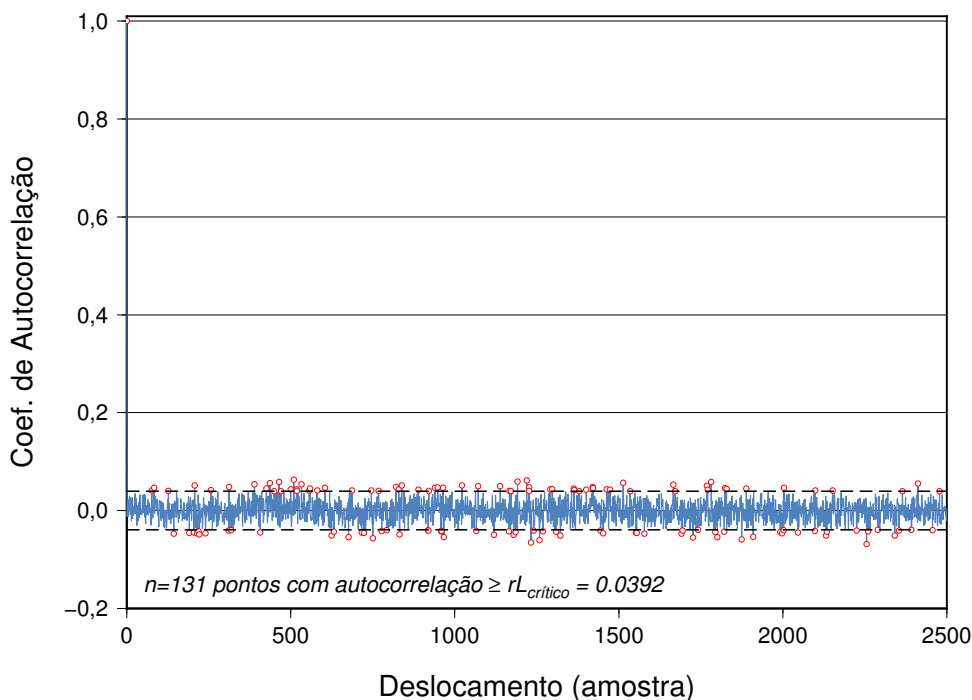


Figura 4.4: Diagrama de autocorrelação da sequência pseudoaleatória apresentada na figura 4.3. As linhas tracejadas correspondem ao coeficiente de correlação crítico $r_{L_{crítico}}$ para a rejeição da hipótese nula de que os valores de correlação tenham sido extraídos de uma população com correlação nula. Em 131 valores do deslocamento L o módulo do coeficiente de correlação foi superior a $r_{L_{crítico}}$.

é 0,081 e a assimetria é -0,00024, bem menor do que a calculada anteriormente. O teste da variável χ^2_{24} de Pearson foi de 26,88, ainda inferior ao valor crítico de 39,4.

A figura 4.7 apresenta o diagrama de autocorrelação correspondente a esse ensaio. Em 100 valores do deslocamento L o módulo do coeficiente de correlação foi superior ao valor de $r_{L_{crítico}}$. Como o número máximo esperado de valores com módulo maior do que 0,0392 é 125, a série produzida não apresenta evidências de autocorrelação.

O algoritmo de Bays e Durham, com os parâmetros definidos em 4.1.2 gerou uma sequência pseudo aleatória com características muito próximas de uma distribuição uniforme no intervalo $(0, 1]$. Embora parâmetros do tenham sido definidos depois de um número pequeno de testes, o algoritmo de Durham, com os parâmetros definidos na equação 4.2.9 será utilizados nos exemplos de aplicação do Método de Monte Carlo que serão apresentados mais adiante.

4.3 Números pseudoaleatórios - gerador de Fibonacci

Um terceiro método muito utilizado para a geração de números aleatórios é o chamado de gerador de Fibonacci, ou algoritmo de Fibonacci. O gerador de Fibonacci consiste em escolher dois números inteiros a_0 e a_1 no intervalo $(0, p-1)$ para iniciar

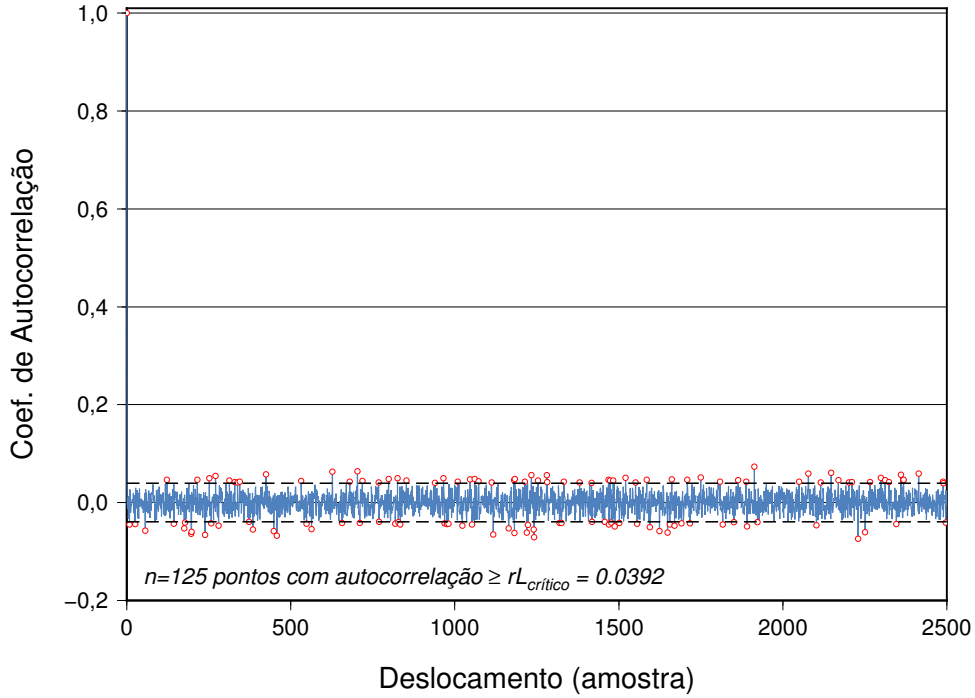


Figura 4.5: Diagrama de autocorrelação para a sequência gerada usando os parâmetros da equação 4.2.8. As linhas tracejadas correspondem ao coeficiente de correlação crítico $r_{L_{crítico}}$ para a rejeição da hipótese nula de que os valores de correlação tenham sido extraídos de uma população com correlação nula. Em 125 valores do deslocamento L o módulo do coeficiente de correlação foi superior a $r_{L_{crítico}}$.

a sequência e definir um terceiro na forma:

$$a_2 = \{a_0 + a_1\} \text{ modulo } p$$

A repetição contínua desse esquema leva a:

$$a_{n+1} = \{a_{n-1} + a_n\} \text{ modulo } p \quad (4.3.10)$$

Note que a equação 4.3.10 é equivalente a:

$$\begin{bmatrix} a_{n+1} \\ a_{n+2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{n-1} \\ a_n \end{bmatrix} \text{ modulo } p \quad (4.3.11)$$

O gerador de Fibonacci recebe esse nome uma vez que a expressão:

$$a_{n+1} = \{a_{n-1} + a_n\}$$

onde a aritmética baseada na operação 'modulo' é abandonada na equação 4.3.10, ou na equação 4.3.11, e considerando que a_0 e a_1 são iguais a 1, gera a famosa sequência de Fibonacci:

$$1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55, 89, 144, 233, 377, \dots$$

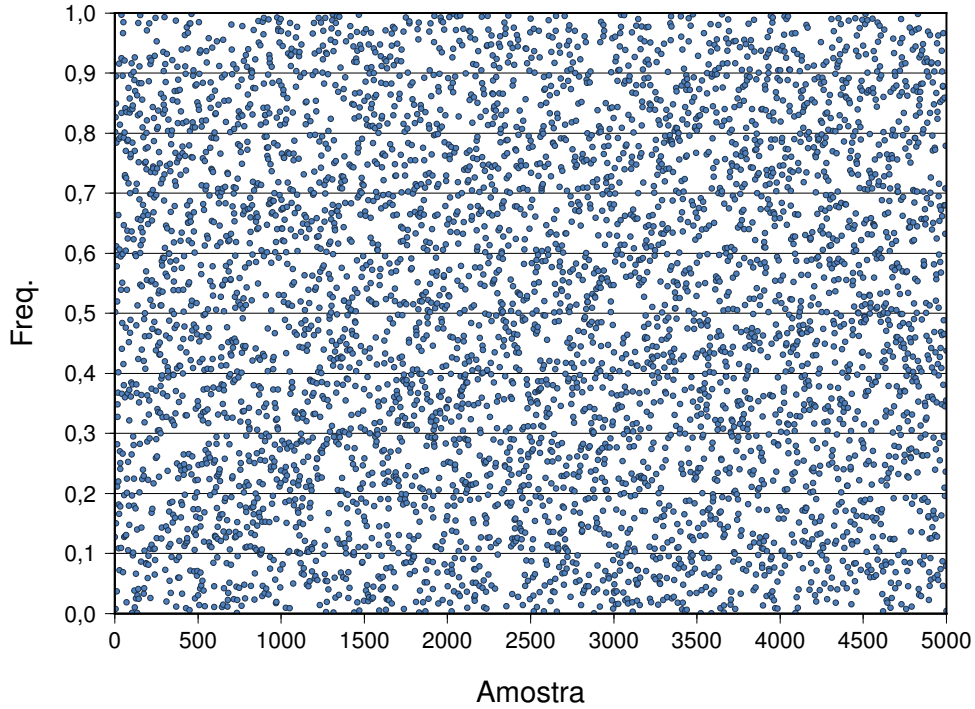


Figura 4.6: Distribuição dos 5000 valores gerados pelo algoritmo de Bays e Durham aplicado sobre os resultados fornecidos pela fórmula de congruência 4.1.2, com os valores definidos em 4.2.9 e normalizados pelo valor de $m = 2^{30}$. O vetor auxiliar tem 100 componentes.

A sequência de Fibonacci é uma sequência determinística com propriedades marcantes e bem definidas. Por exemplo, pode ser demonstrado, e o leitor é convidado a demonstrar que, se a_n for o termo de ordem n da sequência de Fibonacci então ([29]; [8]):

1. $a_{n+1} \times a_{n-1} = a_n^2 + (-1)^n$, quando $n > 2$
2. $a_n = \frac{\{(1 + \sqrt{5})^n - (1 - \sqrt{5})^n\}}{2^n \sqrt{5}}$
3. $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_n}{a_{n-1}} = \frac{\sqrt{5} - 1}{2}$
4. a_n e a_{n+1} são primos entre si

É difícil imaginar que uma sequência desse tipo possa dar origem a um bom gerador de números aleatórios e, de fato, não dá. Fica para a lista de exercícios no final deste capítulo, avaliar a qualidade do gerador de Fibonacci, utilizando a equação 4.3.10.

A equação 4.3.10 pode ser modificada na forma:

$$a_{n+1} = \{a_{n-k} + a_{n-l}\} \text{ modulo } p$$

onde k e l , sendo $l < k$, são chamados de deslocamentos, ou retardos da sequência. Pode-se mostrar que se esses parâmetros satisfizerem um pequeno conjunto de

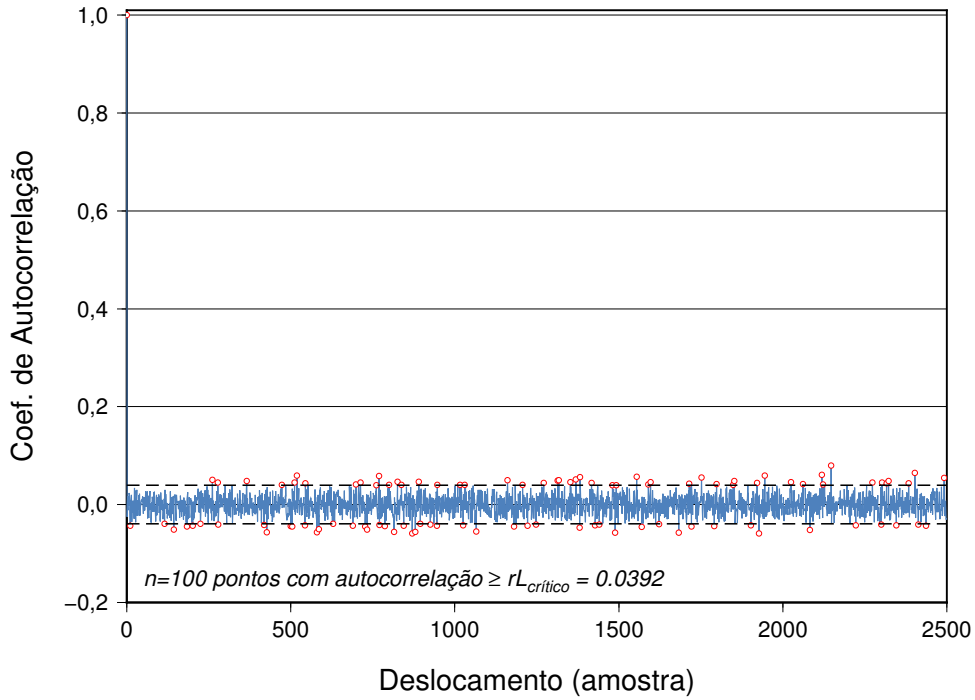


Figura 4.7: Diagrama de autocorrelação para a sequência gerada usando os parâmetros da equação 4.2.9. As linhas tracejadas tem o mesmo significado do que nas figuras 4.2, 4.4 e 4.5. Em 100 valores do deslocamento L o módulo do coeficiente de correlação foi superior a $r_{L_{crítico}}$.

condições, o gerador de números aleatórios que se obtém, chamado de gerador de Fibonacci com atraso, pode ser feito muito eficiente. A demonstração e discussão das condições para que isso aconteça fica, no entanto, fora do alcance de um texto introdutório como este. O leitor interessado pode consultar, por exemplo, [27] e as referências nele citadas.

4.4 Números pseudoaleatórios com distribuições não uniformes.

Até o momento, foram discutidos métodos de geração de números pseudoaleatórios simulando uma distribuição uniforme no intervalo $(0, 1]$. No que segue será discutido a geração de sequências de números pseudoaleatórios simulando distribuições não uniformes.

4.4.1 Mudança de variáveis

No capítulo 3, foi demonstrado que, se uma variável aleatória $Y(v)$ é definida como $Y(v) = g(X(v))$, onde $X(v)$ é outra variável aleatória e $g(x)$ é uma função real, contínua por partes e integrável, a densidade de probabilidade $f_Y(y)$ da variável $Y(v)$ em um ponto y_0 é dada por:

$$f_Y(y) = \frac{f_X(x_{0_1})}{\left| \frac{dg}{dx} \right|_{x_{0_1}}} + \frac{f_X(x_{0_2})}{\left| \frac{dg}{dx} \right|_{x_{0_2}}} + \dots + \frac{f_X(x_{0_n})}{\left| \frac{dg}{dx} \right|_{x_{0_n}}} + \dots$$

onde $f_X(x)$ é a função densidade de probabilidade da variável $X(v)$ e:

$$\{x_{0_1}, x_{0_2}, \dots, x_{0_n}\}$$

são soluções de:

$$y_0 = g(x) \quad (4.4.12)$$

No caso de $g(x)$ ser uma função bijetora, a equação 4.4.12 tem solução única para todos os pontos Y do conjunto imagem de $y = g(x)$ e existe uma função inversa $x = g^{-1}(y)$. Além disso, é conhecido do cálculo diferencial que:

$$\frac{dg}{dx} = \frac{1}{\frac{dg^{-1}}{dy}}$$

e, portanto, pode-se escrever, de uma forma geral que:

$$f_Y(y) = f_X(g^{-1}(y)) \left| \frac{dg^{-1}}{dy} \right|$$

Considere agora uma variável aleatória, real e contínua, $X(v)$ e a sua probabilidade cumulativa:

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

onde $f_X(x) = dF_X/dx$ é a densidade de probabilidade da variável $X(v)$.

Uma nova variável aleatória $Y(v)$ pode ser definida como:

$$Y(v) = F_X(X(v))$$

com $0 < Y(v) < 1$. Como F_X é bijetora, monotônica e crescente:

$$f_Y(y) = \frac{f_X(x)}{\frac{dF_X}{dx}} = \frac{f_X(x)}{f_X(x)} = 1$$

ou seja, $Y(v)$ é uniformemente distribuída em $(0, 1]$, independentemente de qual seja $F_X(x)$.

Para se obter uma variável aleatória com distribuição de probabilidade F_X , basta calcular $X(v) = F_X^{-1}(Y(v))$ com $Y(v)$ uniformemente distribuída em $(0, 1]$.

Por exemplo, para gerar uma variável aleatória com distribuição de probabilidade exponencial, ou seja, gerar $X(v)$ com densidade de probabilidade:

$$f_X(x) = \lambda e^{-\lambda x}$$

e:

$$F_X(x) = 1 - e^{-\lambda x}$$

com $0 < x < \infty$, basta calcular:

$$F_X^{-1}(Y(v)) = X(v) = \frac{1}{\lambda} \ln \left(\frac{1}{1 - Y(v)} \right)$$

com $Y(v)$ uniformemente distribuído em $(0, 1)^2$.

O mesmo raciocínio pode ser, em princípio, aplicado para gerar uma variável aleatória com distribuição normal, que, sem limitar o raciocínio, pode ser considerada como tendo valor esperado igual a zero e variância igual a um. Nesse caso:

$$f_X(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}$$

e:

$$F_X(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{x^2}{2}} dx = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sqrt{2}} \right)$$

onde:

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\xi^2} d\xi$$

é a função erro.

A representação de F_Y na forma que envolve a função erro é uma representação conveniente, uma vez que ela pode ser facilmente calculada através de uma aproximação racional (ver [1]).

A função F_Y é bijetora e monotonicamente crescente. O problema é que não existe forma analítica para a inversa de F_Y . É sempre possível obter a função inversa por métodos gráficos ou numéricos, mas, neste caso, há uma segunda alternativa.

Considere duas variáveis aleatórias independentes $X(v)$ e $Y(v)$, normalmente distribuídas com valor esperado igual a zero e variância igual a um onde:

$$f_X(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} \text{ e } f_Y(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{y^2}{2}} \quad (4.4.13)$$

A densidade de probabilidade conjunta $f_{X,Y}$ é dada por:

$$f_{X,Y}(x, y) = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{x^2+y^2}{2}}$$

onde as variáveis x e y podem ser consideradas como componentes de um sistema cartesiano ortogonal de variáveis. Mudando para um sistema de coordenadas ρ e θ planas polares obtém-se:

$$x = \rho \cos(\theta) \quad y = \rho \sin(\theta)$$

$$\text{onde:} \quad (4.4.14)$$

$$\rho = \sqrt{(x^2 + y^2)} \text{ em } (0, \infty) \text{ e } \tan(\theta) = \frac{y}{x} \text{ em } (0, 2\pi)$$

Definindo duas novas variáveis aleatórias independentes $R(v)$ e $\Theta(v)$ na forma da equação 4.4.14, a densidade de probabilidade nesse novo sistema se escreve:

$$f_{R,\Theta}(\rho, \theta) = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{\rho^2}{2}} \rho$$

²Note que o limite superior do intervalo foi excluído para evitar a ocorrência de uma divisão por zero.

de onde:

$$f_{\Theta}(\theta) = \frac{1}{2\pi} \text{ e } f_{\rho} = e^{-\frac{\rho^2}{2}} \rho$$

ou seja, a variável $\Theta(v)$ é uniformemente distribuída em $(0, 2\pi]$ e $R(v)$ segue uma distribuição de Rayleigh no intervalo $[0, \infty)$. A função de probabilidade cumulativa de Rayleigh é:

$$F_R(\rho) = 1 - \exp\left(-\frac{\rho^2}{2}\right)$$

Da equação 4.4.13 as variáveis aleatórias $X(v) = R(v) \cos(\Theta(v))$ e $Y(v) = R(v) \sin(\Theta(v))$ simulam variáveis aleatórias normalmente distribuídas quando $\Theta(v)$ simula uma variável aleatória uniformemente distribuída em $(0, 2\pi]$ e $R(v)$ simula uma variável aleatória de Rayleigh.

Não custa lembrar que, se $U(v)$ simular uma variável uniformemente distribuída em $(0, 1]$ a variável:

$$R(v) = \sqrt{2 \ln \left(\frac{1}{1 - U(v)} \right)}$$

simula uma variável aleatória de Rayleigh.

4.4.2 Método da inversão

No capítulo 3 foi mostrado que a função $g(x)$ que transforma uma variável aleatória $X(v)$ com distribuição de probabilidade F_X em uma variável aleatória $Y(v)$ com função distribuição de probabilidade F_Y é:

$$g(x) = F_Y^{-1}(F_X(x))$$

Essa relação é usada, de uma forma geral, para se obter uma sequência de números aleatórios caracterizada por uma função de distribuição F_Y partindo de uma sequência caracterizada por F_X .

Tanto o método da mudança de variável, quanto o método da inversão, envolvem o cálculo da função inversa de uma função de probabilidade cumulativa. Em algumas situações, como nos casos da distribuição exponencial e da distribuição de Rayleigh, a inversão é feita algebricamente de forma simples. Existem, no entanto, distribuições de probabilidade em que o cálculo da inversa recai em uma equação transcendente que só pode ser resolvido graficamente ou numericamente. A distribuição normal é um exemplo, embora exista, como já foi visto na subseção 4.4.1, uma forma de se contornar essa dificuldade, para o caso dessa distribuição.

O método de rejeição de von Neumann é um exemplo de método que dispensa o cálculo da inversa de uma distribuição de probabilidade.

4.4.3 Método da rejeição de von Neumann

O método da rejeição de von Neumann é baseado no seguinte argumento³. Considere uma variável aleatória $X(v)$ caracterizada por uma função de probabilidade cumulativa $F_X(x)$ e um evento A definido em função de $X(v)$. A probabilidade

³O desenvolvimento apresentado a seguir é essencialmente o desenvolvimento de [23]

condicional do evento $\{x < X(v) \leq x + \Delta x\}$ ocorrer, dado que o evento A ocorreu, é:

$$P\{x < X(v) \leq x + \Delta x | A\} = \frac{P\{\{x < X(v) \leq x + \Delta x\} \cap A\}}{P(A)}$$

Se Δx for um intervalo suficientemente pequeno:

$$\begin{aligned} P\{x < X(v) \leq x + \Delta x | A\} &= \int_x^{x+\Delta x} f_X(x|A) dx \approx f_X(\bar{x}|A) \Delta x = \\ &= \frac{P\{\{x < X(v) \leq x + \Delta x\} \cap A\}}{P(A)} \end{aligned} \quad (4.4.15)$$

onde $x < \bar{x} \leq x + \Delta x$.

Uma sequência pseudo aleatória $\{y_i, i = 1, 2, \dots\}$ pode ser gerada a partir de uma sequência pseudo aleatória $\{x_j, j = 1, 2, \dots\}$ caracterizada por uma distribuição de probabilidade F_X e de um evento arbitrário A pré-determinado na forma:

$$y_i = \begin{cases} x_j & \text{se o evento } A \text{ ocorre} \\ \text{o valor é rejeitado se o evento } A \text{ não ocorre} \end{cases}$$

Se deseja que $\{y_i, i = 1, 2, \dots\}$ seja uma sequência pseudo aleatória caracterizada por f_Y , é necessário encontrar um evento A tal que $f_Y(y) = f_X(x|A)$. A solução desse problema é definida pelo seguinte teorema:

Teorema 4.1. *Seja $X(v)$ uma variável aleatória caracterizada por uma densidade de probabilidade f_X , $U(v)$ uma variável aleatória uniformemente distribuída em $(0, 1]$ e independente de $X(v)$, e $f_Y(y)$ uma função densidade de probabilidade, tal que $f_Y(x) = 0$ nos intervalos onde $f_X(x) = 0$. Seja A um evento definido como:*

$$A = \{U(v) \leq g(X(v))\}$$

onde:

$$g(x) = a \frac{f_Y(x)}{f_X(x)} \leq 1 \quad (4.4.16)$$

e a é uma constante positiva

então:

$$f_Y(x) = f_X(x|A) \quad (4.4.17)$$

Demonstração: A região onde o par de variáveis aleatórias independentes $X(v)$ e $U(v)$ é definido é $D = \{-\infty < x < \infty\} \times \{0 < u \leq 1\}$. A probabilidade do evento $A = \{(X(v), U(v)) \in D \mid U(v) \leq g(X(v))\}$ é igual a:

$$P\{A\} = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_0^{g(x)} f_{X,U}(x, u) du \right) dx = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) f_X(x) dx$$

uma vez que $f_{X,U}(x, u) = 1 \times f_X(x)$. Da equação 4.4.16 tem-se:

$$P\{A\} = a \int_{-\infty}^{\infty} f_Y(x) dx = a \quad (4.4.18)$$

Note que a equação 4.4.18 limita a ao intervalo $0 < a \leq 1$, embora essa limitação não faça parte das hipóteses do teorema.

Por outro lado, a probabilidade $P\{\{x < X(v) \leq x + \Delta x\} \cap A\}$ é:

$$P\{\{x < X(v) \leq x + \Delta x\} \cap A\} \approx f_X(\bar{x})g(\bar{x})\Delta x \quad (4.4.19)$$

onde $x < \bar{x} \leq x + \Delta x$.

Substituindo as equações 4.4.18, 4.4.19 na equação 4.4.15 e tomando o limite em que Δx tende a zero, tem-se:

$$f_X(x | A) = \frac{f_X(x) g(x)}{a}$$

Usando novamente a equação (4.4.16), obtém-se (4.4.17). ■

O método de geração de uma sequência de números pseudo aleatórios que simule uma variável aleatória $Y(v)$ caracterizada por uma função de densidade de probabilidade $f_Y(y)$, a partir de uma simulação de uma variável aleatória $X(v)$ caracterizada por $f_X(x)$ e por uma simulação de uma distribuição uniforme, consiste em gerar um par de números pseudo aleatórios (x_i, u_i) e definir uma sequência y_j na forma:

$$y_j = \begin{cases} x_i \text{ se, } u_i \leq a \frac{f_Y(x_i)}{f_X(x_i)} \leq 1 \\ \text{o valor é rejeitado se, } u_i > a \frac{f_Y(x_i)}{f_X(x_i)} \end{cases}$$

Por exemplo, pode-se gerar uma sequência que simula uma distribuição normal com média zero e variância igual a 1:

$$F_Y(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^y e^{-\frac{\eta^2}{2}} d\eta \text{ com } -\infty < y < \infty$$

a partir de uma distribuição exponencial:

$$F_X(x) = \frac{1}{2}e^x \text{ se } -\infty < x < 0 \text{ ou } F_X(x) = 1 - \frac{1}{2}e^{-x} \text{ se } 0 \leq x < \infty$$

As funções de densidade de probabilidade correspondentes são:

$$f_X(x) = \frac{1}{2}e^{-|x|}$$

$$f_Y(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{y^2}{2}}$$

A razão:

$$\frac{f_Y(x)}{f_X(x)} = \frac{2}{\sqrt{2\pi}}e^{-(\frac{|x|^2}{2} - |x|)} = \sqrt{\frac{2e}{\pi}}e^{-\frac{1}{2}(|x|-1)^2}$$

é maior do que 1 no intervalo $-2,39 < x < 2,39$. Fazendo:

$$a = \sqrt{\frac{\pi}{2e}} < 1$$

a sequência y_i gerada por:

$$y_j = \begin{cases} x_i \text{ se, } u_i \leq e^{-\frac{1}{2}(|x|-1)^2} \leq 1 \\ \text{o valor é rejeitado se, } u_i > e^{-\frac{1}{2}(|x|-1)^2} \end{cases}$$

simula uma sequência de números pseudo aleatórios caracterizados por uma função densidade de probabilidade $f_Y(y)$.

4.5 Exercícios

1. (a) Escreva uma rotina para computador, baseada no gerador de Fibonacci, sem atraso, para gerar números pseudoaleatórios, uniformemente distribuídos em $(0, 1]$.
 (b) Gere uma sequência de 5.000 números pseudo aleatórios com a sua rotina e verifique se essa sequência tem média, variância e assimetria próximas do que se espera para uma distribuição uniforme.
 (c) Construa um diagrama de dispersão e critique o resultado fornecido pelo gerador de Fibonacci.
 (d) Olhando para o diagrama de dispersão parece razoável combinar o gerador de Fibonacci, sem atraso, com o algoritmo de Bays e Durham?
2. (a) Na falta de coisa melhor, pelo menos por enquanto, escreva uma rotina combinando a fórmula de congruência (4.2) com o algoritmo de Bays e Durham para gerar uma sequência de números pseudo aleatórios uniformemente distribuídos em $(0, 1]$.
 (b) Gere uma sequência de 5.000 números pseudo aleatórios com a sua rotina e verifique se essa sequência tem média, variância e assimetria próximas do que se espera para uma distribuição uniforme.
 (c) Construa um diagrama de dispersão e critique o resultado obtido.
 (d) Ajuste os parâmetros utilizados para obter o que lhe parecer o melhor resultado.
3. Usando a rotina para computador desenvolvida no exercício 15 do capítulo 3, construa um diagrama de autocorrelação da sequência de números pseudo aleatórios gerados no exercício 1. Analise estatisticamente o resultado.
4. Usando a técnica de mudança de variáveis, gere uma sequência de 5.000 números pseudo aleatórios com distribuição de probabilidade de Cauchy:

$$F_X(x) = \frac{1}{\pi} \left(\arctan(x) + \frac{\pi}{2} \right)$$

$$-\frac{\pi}{2} < \arctan(x) < \frac{\pi}{2}$$

Verifique se essa sequência tem média, variância e assimetria próximas do que se espera para distribuição de probabilidade de Cauchy.

5. Usando o método da inversão, gere uma sequência de 5.000 números pseudo aleatórios com distribuição de probabilidade de Laplace:

$$F_X(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}e^x, & \text{para } x < 0 \\ 1 - \frac{1}{2}e^{-x}, & \text{para } x \geq 0 \end{cases}$$

Verifique se essa sequência tem média, variância e assimetria próximas do que se espera para uma distribuição de Cauchy.

6. Usando o método da rejeição de von Neumann, gere uma sequência de 5.000 números aleatórios com distribuição de probabilidade de Maxwell, sabendo que a função de densidade de probabilidade é, nesse caso:

$$f_X(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} x^2 e^{-\frac{x^2}{2}}$$

Verifique se essa sequência tem média, variância e assimetria próximas do que se espera para uma distribuição de Maxwell.

7. Considere que uma partícula se movimenta em uma caixa bidimensional com a forma de um quadrado com um metro de lado. A regra que define o movimento da partícula é a seguinte:
- sendo a posição inicial da partícula (x_0, y_0) , com, $0 < x_0 < 1$ e $0 < y_0 < 1$ encontre a menor distância d do ponto à parede da caixa.
 - escolha ao acaso um ângulo θ considerando que esse ângulo se distribui ao acaso com uma distribuição de probabilidade uniforme no intervalo $0 \leq \theta \leq 2\pi$.
 - defina a nova posição (x_1, y_1) como sendo $x_1 = d \cos(\theta)$ e $y_1 = d \sin(\theta)$.
 - repita o processo até que a menor distância entre a partícula e a parede da caixa seja igual ou menor a 0,001 metro. A essa distância a partícula é atraída pela parede e lá se fixa.

Escolha ao acaso dez pares (x_0, y_0) , uniformemente distribuídos em $\{0 < x < 1\} \times \{0 < y < 1\}$ e trace a trajetória das partículas inicialmente nesses pontos até a sua adsorção pela parede da caixa.

8. Considere uma caixa bidimensional que corresponde à área entre dois quadrados com os lados paralelos e desenhados em torno de um mesmo ponto central. O quadrado maior tem lado igual a 1 metro e o menor tem lado igual a 0,25 metro. Nessa área existem partículas de pó que se movem seguindo a regra definida no exercício 7. Uma partícula não influencia o movimento das outras. A parede externa da caixa (quadrado com um metro de lado) adsorve as partículas quando a distância entre a parede e a partícula é igual ou menor do que 0,001 metro. A parede interna permite que a partícula escape da caixa para a área central quando a distância entre a partícula e a parede é igual ou menor a 0,001 metro. A partícula de pó que entra no espaço central é removida por um aspirador que não influencia o comportamento das partículas dentro da caixa. Qual é a probabilidade de que uma partícula de pó escape da caixa? Você tem certeza, não tem certeza ou não arrisca?

Planeje e conduza um experimento numérico para estimar, com base na frequência do sucesso do experimento, essa probabilidade e compare com a sua avaliação inicial.

Capítulo 5

Integração pelo método de Monte Carlo

O método de Monte Carlo pode ser utilizado, em princípio, para estimar o valor numérico de integrais definidas de qualquer ordem. Nestas notas, o método será inicialmente exemplificado de forma bem simples integrando uma função de uma única variável. Na realidade, ninguém com um mínimo de bom senso, faz, na prática, uma integração desse tipo pelo método de Monte Carlo e o motivo disso vai ficar absolutamente claro logo em seguida. O argumento a ser apresentado tem o objetivo apenas de ressaltar os aspectos mais simples dessa técnica de integração.

O método é indicado para integrais múltiplas com um número muito grande de variáveis e integrais muito difíceis de serem integradas pelos métodos numéricos tradicionais.

Um exemplo muito simples onde a aplicação do método de Monte Carlo passa a ter maior significado é dado pelo cálculo da geometria de detecção em um espectrômetro de radiação alfa, onde o detector é do tipo barreira de superfície. Nesse caso, é comum o arranjo experimental onde tanto fonte radioativa, quanto detector, podem ser representados por superfícies circulares e coaxiais, separadas por uma distância fixa.

5.1 Uma integração simples

O problema consiste em calcular a integral definida de uma função g de uma única variável, absolutamente integrável, contínua no intervalo $(a, b]$:

$$I = \int_a^b g(x) dx \quad (5.1.1)$$

Definindo uma nova variável z na forma:

$$x = a + (b - a)z$$

a integral I passa a ser escrita como:

$$I = \int_0^1 G(z) dz$$

com:

$$G(z) = (b-a)g(a+(b-a)z)$$

Considere que $Z(v)$ seja uma variável caracterizada por uma função densidade de probabilidade f_Z em $(0, 1]$ e defina uma variável aleatória Y como:

$$Y(v) = G(Z(v))$$

O valor esperado da variável aleatória $Y(v)$ é:

$$E\{Y(v)\} = \int_0^1 G(z) f_Z(z) dz$$

Se a variável aleatória $Z(v)$ for uniformemente distribuída em $(0, 1]$, o valor esperado da variável $Y(v)$ será:

$$E\{Y(v)\} = \int_0^1 G(z) dz$$

ou seja, a integral 5.1.1 será o valor esperado da variável $Y(v)$.

Uma estimativa do valor esperado $Y(v)$ pode ser obtida calculando G em um número N grande de pontos $\{z_i, i = 1, 2, \dots, N\}$ uniformemente distribuídos no intervalo $(0, 1]$ e calcular o valor médio desses valores de G , na forma:

$$E\{Y(v)\} = \int_0^1 G(z) dz \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N G(z_i)$$

A precisão da estimativa I é o erro padrão da média $\sigma_P(I)$ dessa estimativa, que é calculado na forma:

$$\sigma_P(I) = \sqrt{\frac{1}{N(N-1)} \sum_{i=1}^N (G(z_i) - I)^2}$$

Note que a incerteza dos valores de I depende do número de termos utilizados no seu cálculo. A variância de I deve tender a um valor fixo à medida que N cresce, enquanto que o desvio padrão da média depende aproximadamente do inverso da raiz quadrada de N .

O método de integração de Monte Carlo tem uma precisão que aumenta de forma lenta com o aumento de N . A precisão do resultado pode ser melhorada através de algumas técnicas, onde a mais simples é a repetição do cálculo da integral e o uso da média e do erro padrão da média como estimativa da integral desejada.

5.1.1 Um exemplo prático

Considere a função erro, definida como:

$$\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\xi^2} d\xi$$

O valor de da função erro para um valor fixo de x pode ser estimado como:

$$\operatorname{erf}(x) \approx \frac{2x}{N\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^N e^{-x^2 \eta_i^2} \quad (5.1.2)$$

onde η_i são extrações de uma variável aleatória uniformemente distribuída em $(0, 1]$.

A incerteza da estimativa da função $\operatorname{erf}(x)$ é:

$$\sigma_P(\operatorname{erf}(x)) = \frac{2x}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{1}{N(N-1)} \sum_{i=1}^N \left(e^{-x^2 \eta_i^2} - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e^{-x^2 \eta_i^2} \right)^2} \quad (5.1.3)$$

A tabela 5.1.1 apresenta valores estimados da função $\operatorname{erf}(x)$ calculados pelo método de integração de Monte Carlo e o valor da incerteza dessas estimativas. Os valores foram estimados utilizando de 10.000 extrações da sequência pseudoaleatória discutida no capítulo 4, que simula uma distribuição uniforme no intervalo $(0, 1]$. As incertezas apresentadas correspondem a um erro padrão da média. A tabela apresenta também o mesmo valor calculado como a média de 10 repetições do cálculo por Monte Carlo para o mesmo valor do argumento da função erro e a incerteza apresentada corresponde a um erro padrão da média calculada com esses 10 valores. Os valores estimados pelo método de integração de Monte Carlo são, também, comparados com os valores da função $\operatorname{erf}(x)$ calculados pela aproximação racional:

$$\operatorname{erf}(x) = 1 - \frac{1}{(1 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + a_4 x^4 + a_5 x^5 + a_6 x^6)^{16}} + \epsilon(x) \quad (5.1.4)$$

com [1]:

$$\begin{aligned} |\epsilon(x)| &\leq 3 \cdot 10^{-7} \\ a_1 &= 0,0705230784 \\ a_2 &= 0,0422820123 \\ a_3 &= 0,0092705272 \\ a_4 &= 0,0001520143 \\ a_5 &= 0,0002765672 \\ a_6 &= 0,0000430638 \end{aligned}$$

Essa última comparação é feita aqui para estimar a exatidão do cálculo, que parece ser bastante boa.

Convém aqui lembrar que precisão e exatidão têm significados diferentes quando se fala de ciência. Precisão de um resultado é uma indicação de como esse resultado é conhecido. Quanto maior a precisão da estimativa de um número, menor é a faixa de variação dos valores individuais em torno do valor estimado. Exatidão, que é um parâmetro bem mais difícil de estabelecer, indica o quanto o valor estimado, não importa com que precisão, representa de fato a grandeza que se deseja determinar.

A tabela 5.1.1 mostra também mostra que, embora o objetivo da comparação não seja esse, mesmo utilizando um número grande (10.000) de extrações da distribuição uniforme, a precisão do cálculo feito por Monte Carlo é menor do que a precisão da aproximação racional. Na realidade a precisão varia com o argumento da função erro, mas com a exceção de valores muito pequenos, com o argumento $x \leq 0,1$, a diferença de precisão é muito grande. Por exemplo, de $x = 0,3$, o erro padrão da média é 0,000086, ou seja da ordem de 10^{-4} . Como a precisão do cálculo por Monte

<i>argumento</i>	<i>aproximação racional</i>	<i>Monte Carlo</i>	<i>Monte Carlo</i> (com repetição)
0,1	0,11246275	0,1124670 $\pm 0,0000030$	0,1124633 $\pm 0,0000015$
0,2	0,22270277	0,222733 $\pm 0,000026$	0,2227079 $\pm 0,0000098$
0,3	0,32862702	0,328714 $\pm 0,000086$	0,328646 $\pm 0,000033$
0,4	0,42843994	0,42859 $\pm 0,00020$	0,428440 $\pm 0,000075$
0,5	0,52049965	0,52086 $\pm 0,00037$	0,52059 $\pm 0,00014$
0,6	0,60400802	0,60443 $\pm 0,00062$	0,60401 $\pm 0,00024$
0,7	0,67780101	0,67863 $\pm 0,00093$	0,67803 $\pm 0,00036$
0,8	0,74210101	0,7432 $\pm 0,0013$	0,74243 $\pm 0,00051$
0,9	0,79690844	0,7983 $\pm 0,018$	0,79734 $\pm 0,00068$
1,0	0,84270102	0,8444 $\pm 0,0022$	0,84326 $\pm 0,00087$

Tabela 5.1: Função $\text{erf}(x)$ calculada pelo método de integração de Monte Carlo, com e sem repetição, equação 5.1.2, com estimativa de incerteza (um erro padrão da média), equação 5.1.3, e comparada com o valor obtido por aproximação racional 5.1.4. O valor absoluto do resto da aproximação racional é igual ou inferior a 3×10^{-7} .

Carlo aumenta com a raiz quadrada do número de termos utilizados, para atingir a precisão da aproximação racional seriam necessárias da ordem de 10^{10} extrações da sequência pseudoaleatória, um número verdadeiramente enorme.

Considere, por outro lado que a integral que define a função erro seja feita pela regra generalizada do trapézio ([5]; [30]). Fazendo:

$$y = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp(-x^2)$$

e dividindo o intervalo $(0, x)$ em n subintervalos de comprimento $h = x/n$ e limitados pela sequência de pontos $\{x_0, x_1, x_2, \dots, x_n\}$ a regra generalizada do trapézio se escreve:

$$\int_0^x y(x)dx = h \left(\frac{y_0}{2} + y_1 + y_2 + \dots + y_{n-1} + \frac{y_n}{2} \right) + \text{resto}$$

onde y_i é o valor do integrando em x_i e:

$$\text{resto} = -\frac{nh^3}{12} \frac{d^2y}{dx^2} \Big|_{\bar{x}} = -\frac{xh^2}{12} \frac{d^2y}{dx^2} \Big|_{\bar{x}}$$

com

$$0 \leq \bar{x} \leq x$$

Utilizando $n = 300$, a função $\text{erf}(x)$ pode ser calculada, no ponto $x = 0,3$ com um resto da ordem de 10^{-6} .

O resultado apresentado acima não deve desiludir ninguém. Ele foi apresentado, primeiro para introduzir da forma mais simples possível o princípio do método e, segundo, para mostrar de forma explícita que o método de Monte Carlo é um recurso que, devido às suas limitações de precisão e ao trabalho computacional envolvido, deve ser escolhido quando não há outra alternativa prática. Integrais com integrando relativamente regular em um espaço com poucas dimensões, em geral, são integradas de forma mais simples e com melhor precisão através de métodos tradicionais de integração numérica. O método de integração de Monte Carlo, em geral, é reservado para problemas em espaços de muitas dimensões.

Existem procedimentos, além da repetição do cálculo, que melhoram a precisão da integração. Esses procedimentos não serão discutidos nesta introdução aos métodos de Monte Carlo, mas o leitor interessado pode consultar, por exemplo, [14] e [16].

5.2 Integrais múltiplas

5.2.1 Primeiro método - valor esperado

Considere, inicialmente, a integral de uma função de duas variáveis reais $g(x_1, x_2)$:

$$I = \int_R \int g(x_1, x_2) dx_1 dx_2$$

onde a $R = \{a_1 < x_1 \leq A_1\} \times \{a_2 < x_2 \leq A_2\}$.

Definindo novas variáveis:

$$x_1 = a_1 + (A_1 - a_1)z_1 \text{ e } x_2 = a_2 + (A_2 - a_2)z_2 \quad (5.2.5)$$

a integral I passa a ser escrita como:

$$I = \int_{\sigma} \int g((a_1 + (A_1 - a_1)z_1), (a_2 + (A_2 - a_2)z_2))(A_1 - a_1)(A_2 - a_2) dz_1 dz_2$$

onde $(A_1 - a_1)(A_2 - a_2)$ é o determinante funcional da transformação 5.2.5 e $\sigma = \{0 < z_1 \leq 1\} \times \{0 < z_2 \leq 1\}$, ou:

$$I = \int_{\sigma} \int G(z_1, z_2) dz_1 dz_2$$

com $G(z_1, z_2) = g((a_1 + (A_1 - a_1)z_1), (a_2 + (A_2 - a_2)z_2))(A_1 - a_1)(A_2 - a_2)$.

Repetindo o argumento utilizado quando se tratou da integração em uma única direção, se $Z_1(v)$ e $Z_2(v)$ forem variáveis aleatórias independentes no intervalo $(0, 1]$, o valor esperado da variável aleatória $Y(v) = G(Z_1(v), Z_2(v))$ é igual a I .

Escolhendo-se um número N grande de valores de $Z_1(v)$ e $Z_2(v)$ extraídos de uma distribuição uniforme em $(0, 1]$ e formando um número N de pares $\{(z_{1_i}, z_{2_i})\}$ com $\{i = 1, 2, \dots, N\}$

$$\int_{\sigma} \int G(z_1, z_2) dz_1 dz_2 = \frac{1}{N} \sum_i G(z_{1_i}, z_{2_i}) \quad (5.2.6)$$

A estimativa de incerteza do valor de I calculado pela equação 5.2.6 é dada por:

$$\sigma_P(I) = \sqrt{\frac{1}{N(N-1)} \sum_i (G(z_{1_i}, z_{2_i}) - I)^2}$$

Considere agora que a função g é integrada em uma região S de \mathbb{R}^2 limitada por uma fronteira F_S formada pela união de um conjunto de curvas simples:

$$I = \int_S \int g(x_1, x_2) dx_1 dx_2$$

Usando as transformações 5.2.5, onde a_1 , A_1 , a_2 e A_2 são escolhidos de forma que $\{S \subset \{a_1 < x_1 \leq A_1\} \times \{a_2 < x_2 \leq A_2\}\}$

$$I = \int_{\Gamma} \int G(z_1, z_2) dz_1 dz_2$$

onde $\Gamma \subset \{0 < z_1 \leq 1\} \times \{0 < z_2 \leq 1\}$ e onde a fronteira F_S se transforma na fronteira Φ_{Γ} .

Definindo variáveis aleatórias $Z_1(v)$ e $Z_2(v)$, independentes e uniformemente distribuídas em $(0, 1]$ e uma nova variável aleatória $Y(v) = G(Z_1(v), Z_2(v))$, o valor esperado de $Y(v)$, agora com a condição de que $\{(Z_1(v), Z_2(v))\} \subset \Gamma$ é dada por:

$$E\{Y(v) \mid (Z_1(v), Z_2(v)) \subset \Gamma\} = \frac{\int_{\Gamma} \int G(z_1, z_2) dz_1 dz_2}{\int_{\Gamma} \int dz_1 dz_2} \quad (5.2.7)$$

Para o cálculo aproximado de I , gera-se um número N grande de valores de $Z_1(v)$ e $Z_2(v)$ extraídos de uma distribuição uniforme em $(0, 1]$, formando um número N de pares $\{(z_{1_i}, z_{2_i})\}$ com $i = 1, 2, \dots, N$, e desse conjunto escolhe-se os n pares $\{(z_{1_i}, z_{2_i}) \in \Gamma\}$. A integral I passa então a ser estimada por:

$$\int_{\Gamma} \int G(z_1, z_2) dz_1 dz_2 \approx \frac{\int_{\Gamma} \int dz_1 dz_2}{n} \sum_{i=1}^n G(z_{1_i}, z_{2_i})$$

ou:

$$\int_{\Gamma} \int G(z_1, z_2) dz_1 dz_2 \approx \frac{\Gamma}{n} \sum_{i=1}^n G(z_{1_i}, z_{2_i})$$

com a condição:

$$\{(z_{1_i}, z_{2_i})\} \subset \Gamma$$

A estimativa de incerteza do valor de I calculado pela equação 5.2.7 é obtida da mesma forma que anteriormente:

$$\sigma_P(I) = \Gamma \sqrt{\frac{1}{n(n-1)} \sum_{i=1}^n (G(z_{1_i}, z_{2_i}) - \bar{G})^2}$$

onde \bar{G} é a média dos n valores de G .

A extensão desse resultado para uma integral múltipla de ordem M é imediata. Nesse caso, no entanto, o cálculo de Γ pode, por si só, representar alguma dificuldade. Uma estimativa de Γ pode ser feita, à custa de piorar a precisão do cálculo, na forma:

$$\Gamma \approx \frac{n}{N} \quad (5.2.8)$$

desde que N seja grande, para justificar a equação 5.2.8 como uma aproximação de:

$$P\{(z_{1_i}, z_{2_i}) \subset \Gamma\} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{n}{N}$$

5.2.2 Segundo método - probabilidade

A integral da função $y = g(x_1, x_2) \geq 0$ em uma região S de \mathbb{R}^2 limitada por uma curva fechada simples F_R :

$$I = \int_S \int g(x_1, x_2) dx_1 dx_2$$

é igual ao volume do sólido geométrico definido pelo conjunto de pontos:

$$V = \{\{(x_1, x_2)\} \times \{0 \leq y \leq g(x_1, x_2)\} \mid (x_1, x_2) \subset S\} \quad (5.2.9)$$

Considerando y como uma nova variável independente, o mesmo volume pode ser calculado na forma:

$$I = \int \int_V \int dx_1 dx_2 dy$$

com V dado pela equação 5.2.9.

Considerando, sem perda de generalidade, que $0 \leq x_1 \leq 1$ e $0 \leq x_2 \leq 1$, e fazendo $B = \max(g(x_1, x_2))$, pode-se definir uma variável:

$$0 \leq x_3 = \frac{1}{B} g(x_1, x_2) \leq 1$$

e o volume I passa a ser escrito como:

$$I = B \int \int_{\sigma} \int dx_1 dx_2 dx_3$$

onde:

$$\sigma = \{\{(x_1, x_2)\} \times \{0 \leq x_3 \leq \frac{1}{B} g(x_1, x_2)\} \mid (x_1, x_2) \subset S\}$$

Definindo-se três variáveis independentes $X_1(v)$, $X_2(v)$ e $X_3(v)$, uniformemente distribuídas em $(0, 1]$, o volume I pode ser considerado como sendo:

$$I = B P\{(X_1(v), X_2(v), X_3(v)) \subset \sigma\} = \frac{\sigma B}{\text{volume } \{\{0 \leq x_1 \leq 1\} \times \{0 \leq x_2 \leq 1\} \times \{0 \leq x_3 \leq 1\}\}} = \sigma B \quad (5.2.10)$$

Extraindo-se um número grande N de amostras para cada uma das variáveis aleatórias $X_1(v)$, $X_2(v)$ e $X_3(v)$, formando um conjunto com N ternos ordenados $\{(X_{1_i}(v), X_{2_i}(v), X_{3_i}(v))\}$ com $\{i = 1, 2, \dots, N\}$ e escolhendo desse conjunto o subconjunto com M elementos $\{(X_{1_i}(v), X_{2_i}(v), X_{3_i}(v)) \subset \sigma\}$, o volume I pode ser estimado como:

$$I = B P\{(X_1(v), X_2(v), X_3(v)) \subset \sigma\} \approx B \left(\frac{M}{N} \right) \quad (5.2.11)$$

Considere agora que a função $g(x_1, x_2)$ seja limitada na forma $b \leq g(x_1, x_2) \leq B$ quando $\{(x_1, x_2) \subset S\}$. Definindo uma nova função $G(x_1, x_2)$ na forma $g(x_1, x_2) = b + (B - b)G(x_1, x_2)$ a integral I se escreve:

$$I = \int_S \int g(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = bS + (B - b) \int_S \int G(x_1, x_2) dx_1 dx_2$$

onde $0 \leq G(x_1, x_2) \leq 1$. A integral:

$$\int_S \int G(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = \int \int_{\sigma} \int dx_1 dx_2 dx_3$$

onde, neste caso, $\sigma = \{(x_1, x_2)\} \times \{0 \leq x_3 \leq G(x_1, x_2)\} \mid (x_1, x_2 \subset S)\}$. O resto do cálculo segue o procedimento que levou à equação 5.2.11, lembrando que o fator correspondente a B naquela equação tem, neste caso, o valor 1.

Imagine o experimento aleatório que consiste em fixar um volume σ contido em um volume unitário em \mathbb{R}^3 e escolher N pontos (x_1, x_2, x_3) onde cada coordenada é uma extração de uma variável aleatória independente das outras duas coordenadas e uniformemente distribuída em $(0, 1]$. Nesse caso, o conjunto de N pontos do espaço \mathbb{R}^3 $\{(x_{1_i}, x_{2_i}, x_{3_i})\}$ com $\{i = 1, 2, \dots, N\}$ pode ser tido como uma amostra do espaço de probabilidade discreto e finito desse experimento. Sendo p a probabilidade de que um ponto (x_1, x_2, x_3) em particular esteja contido no volume σ , a probabilidade de se escolher ao acaso M pontos que estejam contidos nesse volume é dada pela distribuição binomial:

$$P\{(x_1, x_2, x_3) \subset \sigma\} = \frac{(N)!}{M!(N - M)!} p^M (1 - p)^{N - M}$$

cujo valor esperado é $E\{M_{\text{pontos}} \subset \sigma\} = Np$ e cuja variância é $\text{var}\{M_{\text{pontos}} \subset \sigma\} = Np(1 - p)$. A equação 5.2.10 mostra que a probabilidade p é o próprio volume sigma, que é desconhecido. Adotando, por falta de outra alternativa melhor, a estimativa $p = M/N$, a estimativa de I dada pela equação 5.2.11 passa a ter como estimativa de variância:

$$\text{var}\{I\} \approx \frac{B^2}{N} \left(\frac{M}{N} \left(1 - \frac{M}{N} \right) \right)$$

Quando N se torna muito grande, a razão M/N tende a um valor fixo e a variância de I passa a depender essencialmente de N .

5.2.3 Um exemplo simples - o cálculo de um ângulo sólido

Considere que a atividade de uma fonte delgada de um emissor alfa, na forma de um disco com raio R_a é medida por um detector do tipo barreira de superfície [17], que pode ser, do ponto de vista geométrico, aproximado a um círculo de raio R_d . O arranjo experimental, esquematizado na figura 5.1, consiste em uma montagem onde detector e fonte são mantidas com as suas superfícies paralelas e alinhadas a um eixo perpendicular às superfícies e que passa pelo centro dos dois elementos. A distância entre fonte e detector é h .

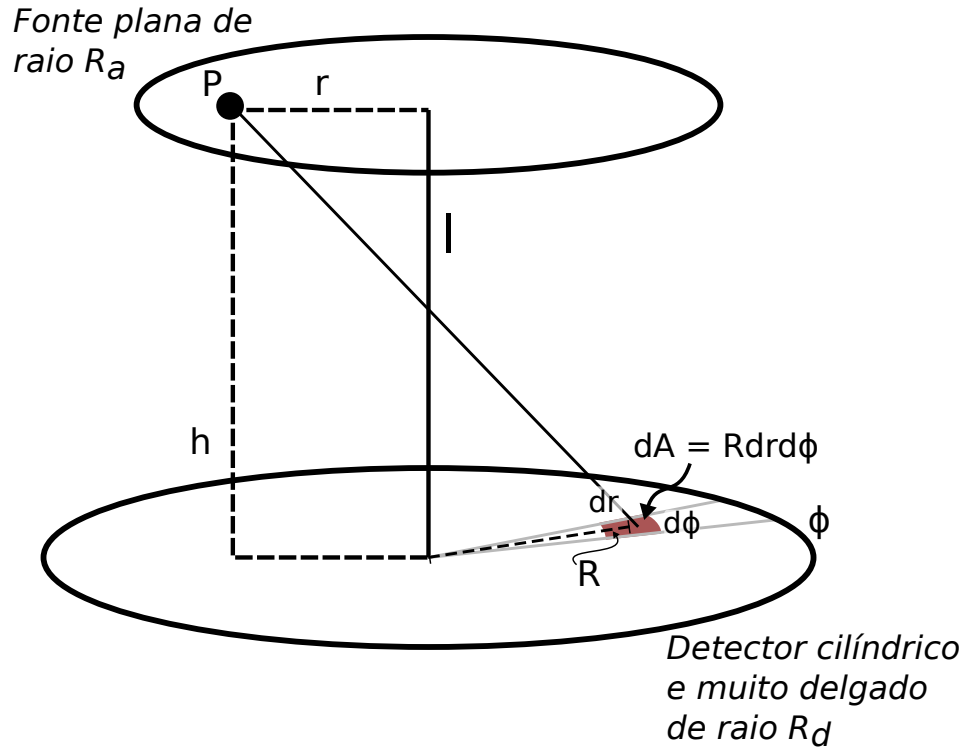


Figura 5.1: Esquema geométrico para o cálculo da geometria de detecção de uma fonte plana na forma de disco por um detector cilíndrico e muito delgado.

A contagem por unidade de tempo registrada no detector não corresponde à atividade real da fonte $\pi R_a^2 S_0$, onde S_0 é a atividade da fonte por unidade de área, primeiro porque nem todas as partículas alfa são emitidas na direção do detector e, segundo, porque os detectores, de uma forma geral, têm uma eficiência intrínseca de detecção inferior a 1. O problema a ser considerado aqui consiste na correção do primeiro aspecto, que é um aspecto puramente geométrico.

Seguindo o esquema da figura 5.1.1, o ângulo sólido com que o ponto P da fonte enxerga o elemento de área dA do detector S é:

$$d\Omega_P = \frac{h}{(\sqrt{h^2 + r^2 + R^2 - 2rR \cos \phi})^3} R dr d\phi$$

onde r é a distância do ponto P ao centro da fonte, R é a distância do centro do elemento de área ao centro do detector e ϕ é o ângulo entre as direções de r e R .

Integrando sobre o detector tem-se:

$$\Omega_P = 2 \int_0^\pi \int_0^{R_d} \frac{h}{(\sqrt{h^2 + r^2 + R^2 - 2rR \cos \phi})^3} R dr$$

e integrando-se sobre a fonte tem-se:

$$\Omega = 4\pi \int_0^{R_a} r dr \int_0^\pi d\phi \int_0^{R_d} \frac{h}{(\sqrt{h^2 + r^2 + R^2 - 2rR \cos \phi})^3} R dR$$

O número de partículas que incidem sobre o detector é:

$$N = S_0 \int_0^{R_a} r dr \int_0^\pi d\phi \int_0^{R_d} \frac{h}{(\sqrt{h^2 + r^2 + R^2 - 2rR \cos \phi})^3} R dR$$

e a fração das partículas emitidas pela fonte que atingem o detector é:

$$I = \frac{1}{\pi R_a^2} \int_0^{R_a} r dr \int_0^\pi d\phi \int_0^{R_d} \frac{h}{(\sqrt{h^2 + r^2 + R^2 - 2rR \cos \phi})^3} R dR \quad (5.2.12)$$

Usando o método do valor esperado, a integral (5.43) é aproximada por:

$$I \approx h R_d^2 \sum_i \frac{x_{1_i} x_{3_i}}{(\sqrt{h^2 + R_d^2 x_{1_i}^2 + R_a^2 x_{3_i}^2 - 2R_a R_d x_{1_i} x_{3_i} \cos(\pi x_{2_i})})^3} \quad (5.2.13)$$

onde x_{1_i} , x_{2_i} e x_{3_i} são extrações de distribuições uniformes em $(0, 1]$. A tabela 5.2 apresenta os valores da integral 5.2.12, estimados pela aproximação de Monte Carlo 5.2.13, onde foram utilizadas 10.000 extrações de cada componente para formar, de forma pseudoaleatória, 10.000 pares do terno (x_1, x_2, x_3) . As incertezas nos valores de Monte Carlo correspondem a um erro padrão da média. As incertezas relativas calculadas de um máximo de 0,12, para o menor valor de h , 0,1, para valores entre 0,007 e 0,009 para valores de h superiores a 2,5.

A integral 5.2.12 é um exemplo de integral múltipla para o qual o método de Monte Carlo começa a representar, de fato, uma alternativa de cálculo. No caso particular dessa integral, no entanto, existe uma solução alternativa, que não é muito conhecida e que foi apresentada por [28](ver apêndice deste capítulo). A integral 5.2.12 representa um arranjo experimental com simetria cilíndrica e, por isso, pode ser expressa em termos de uma expressão, na realidade uma integral em uma dimensão, envolvendo funções de Bessel de ordem um, na forma:

$$I = \frac{R_d}{R_a} \int_0^\infty e^{-\lambda h} \lambda^{-1} J_1(\lambda R_a) J_1(\lambda R_d) d\lambda \quad (5.2.14)$$

A equação 5.2.14 pode ser integrada de forma simples por métodos convencionais de integração numérica. O resultado fornecido pela equação 5.2.14 também é apresentado na tabela 5.2, como uma estimativa da exatidão do resultado obtido pelo método de Monte Carlo.

A equação 5.2.14 é válida para o caso de uma montagem coaxial de fonte e detector. Não existe, ou pelo menos os autores não conhecem, solução em forma fechada para situações onde a simetria axial deixa de existir. Por exemplo, se fonte e detector forem lateralmente deslocados um em relação ao outro. Nesse caso, e para arranjos com geometria bem mais complexa, a integração pelo método de Monte Carlo é um recurso importante e, muitas vezes, indispensável.

<i>altura h</i>	<i>raio do detector R_d</i>	<i>fração I Monte Carlo</i>	<i>fração I Integral (5.45)</i>
0,1	0,5	$0,1153 \pm 0,0048$	0,1111
0,1	1,0	$0,369 \pm 0,018$	0,3922
0,1	2,5	$0,419 \pm 0,038$	0,4788
0,1	5,0	$0,443 \pm 0,053$	0,4920
0,1	7,5	$0,396 \pm 0,041$	0,4963
0,1	10,0	$0,528 \pm 0,085$	0,4984
1,0	0,5	$0,03463 \pm 0,00029$	0,03471
1,0	1,0	$0,1166 \pm 0,012$	0,11610
1,0	2,5	$0,3069 \pm 0,0034$	0,3055
1,0	5,0	$0,3950 \pm 0,052$	0,4009
1,0	7,5	$0,4238 \pm 0,0066$	0,4344
1,0	10,0	$0,4410 \pm 0,0081$	0,4515
2,5	0,5	$0,008764 \pm 0,000093$	0,008737
2,5	1,0	$0,03291 \pm 0,00028$	0,03271
2,5	2,5	$0,1419 \pm 0,0011$	0,1411
2,5	5,0	$0,2755 \pm 0,0021$	0,2742
2,5	7,5	$0,3412 \pm 0,0029$	0,3411
2,5	10,0	$0,3736 \pm 0,0035$	0,3786
5,0	0,5	$0,002417 \pm 0,000021$	0,002410
5,0	1,0	$0,009475 \pm 0,000081$	0,009445
5,0	2,5	$0,05193 \pm 0,00043$	0,05173
5,0	5,0	$0,1459 \pm 0,0011$	0,1451
5,0	7,5	$0,2231 \pm 0,0016$	0,22176
5,0	10,0	$0,2772 \pm 0,0020$	0,27588
10,0	0,5	$0,0006212 \pm 0,0000054$	0,0006192
10,0	1,0	$0,002471 \pm 0,000022$	0,002463
10,0	2,5	$0,01488 \pm 0,00013$	0,01482
10,0	5,0	$0,05273 \pm 0,00043$	0,05251
10,0	7,5	$0,10014 \pm 0,00077$	0,09965
10,0	10,0	$0,1469 \pm 0,0011$	0,1461

Tabela 5.2: Cálculo da integral 5.2.12 pelo método de Monte Carlo e através da equação 5.2.14. O raio da fonte R_a foi mantido fixo em 1 e a altura h e o raio do detector R_d são expressos na mesma escala de R_a . As incertezas dos valores obtidos por Monte Carlo correspondem a um erro padrão da média. Os resultados fornecidos pela equação 5.2.14 são apresentados com quatro cifras exatas.

5.3 Exercícios

1. Quando se deseja calcular a eficiência de detecção de sensores de radiação nuclear, como, por exemplo, espectrômetros gama, é comum ter-se necessidade de calcular integrais que representam geometrias de detecção com pouca simetria. Nesses casos, o método de Monte Carlo é particularmente útil. No caso deste exercício, a integral que será resolvida aparece em problemas de calibração de espectrômetros portáteis ou aerotransportados para prospecção geofísica. Trata-se de um caso de geometria cilíndrica que simplifica muito o problema. A integral em questão é:

$$f = \mu \int_0^T \int_0^R \frac{1}{\sqrt{(H+x)^2 + r^2}} e^{-\mu \frac{x}{H+x}} \sqrt{(H+x)^2 + r^2} r dr dx$$

Escreva um programa para calcular essa integral e utilize os seguintes fatores numéricos: $R = 150$, $T = 50$, $H = 10$ e $\mu = 0,08337$.

2. Considere uma barra de aço homogênea com densidade ρ , na forma de um prisma reto com secção transversal octogonal inscrita em um círculo de raio igual a 1 e com altura igual a 2. Nessa barra de aço é feito um furo cônico que, sobre a base e sobre o topo do prisma, tem um diâmetro de 1,5 e na metade da altura do prisma tem um diâmetro de 0,5. Usando o método de integração de Monte Carlo, calcule o momento de inércia dessa barra em torno do seu eixo de simetria.

Observações:

- (a) Escreva seu próprio programa.
- (b) Os autores, quando testaram o exercício, acharam mais fácil calcular separadamente o momento de inércia do prisma maciço, o momento de inércia correspondente a um corpo igualmente maciço com a forma do furo e subtrair o momento do corpo com a forma do furo do momento do prisma maciço.
- (c) O cálculo dos momentos requer que o volume do corpo seja calculado nas variáveis transformadas para coordenadas cartesianas no intervalo $(0, 1]$. Esses volumes podem ser calculados analiticamente. Compare o valor calculado com a estimativa dada pela fração do número de pontos aleatórios gerados, que foi realmente utilizada no cálculo.

5.4 Apêndice - Cálculo analítico da geometria de detecção, para o caso de um arranjo cilíndrico coaxial

Neste apêndice será obtida a equação 5.2.14. Essa integral, citada em [28], foi obtida originalmente, como esses autores mencionam, por [24].

O integrando da integral 5.2.14:

$$f(h, r, R, \phi) = \frac{h}{(h^2 + r^2 + R^2 - 2rR \cos(\phi))^{\frac{3}{2}}}$$

Fazendo $\rho^2 = r^2 + R^2 - 2rR \cos(\phi)$, usando a integral de Lipschitz:

$$\frac{1}{\sqrt{\rho^2 + h^2}} = \int_0^\infty e^{-\lambda h} J_0(\lambda \rho) d\lambda \quad (5.4.15)$$

onde J_0 é a função de Bessel de primeira espécie e ordem zero e derivando a equação (5.47) em relação a h se obtém:

$$\frac{h}{(h^2 + r^2 + R^2 - 2rR \cos(\phi))^{\frac{3}{2}}} = \int_0^\infty \lambda e^{-\lambda h} J_0(\lambda \rho) d\lambda \quad (5.4.16)$$

A função de Bessel $J_0(\lambda \rho)$ pode ser escrita como ([15], capítulo 3, exercício 3.12):

$$J_0(\lambda \rho) = J_0(\lambda \sqrt{h^2 + r^2 + R^2 - 2rR \cos(\phi)}) = \sum_{m=-\infty}^{m=\infty} e^{im\phi} J_m(\lambda r) J_m(\lambda R) \quad (5.4.17)$$

onde $i = \sqrt{-1}$ é a unidade imaginária.

Expandindo a somatória do segundo membro da equação 5.4.17:

$$\begin{aligned} \sum_{m=-\infty}^{m=\infty} e^{im\phi} J_m(\lambda r) J_m(\lambda R) &= J_0(\lambda r) J_0(\lambda R) + \\ \sum_{m=1}^{m=\infty} (e^{im\phi} J_m(\lambda r) J_m(\lambda R) + e^{-im\phi} J_{-m}(\lambda r) J_{-m}(\lambda R)) \end{aligned} \quad (5.4.18)$$

e, lembrando da propriedade das funções de Bessel de ordem inteira $J_{-m}(x) = (-1)^m J_m(x)$:

$$\begin{aligned} \sum_{m=1}^{m=\infty} (e^{im\phi} J_m(\lambda r) J_m(\lambda R) + e^{-im\phi} J_{-m}(\lambda r) J_{-m}(\lambda R)) &= \\ \sum_{m=1}^{m=\infty} (e^{im\phi} + e^{-im\phi}) J_m(\lambda r) J_m(\lambda R) &= \\ 2 \sum_{m=1}^{m=\infty} \cos(m\phi) J_m(\lambda r) J_m(\lambda R) \end{aligned}$$

A equação 5.4.18 fica então:

$$\begin{aligned} \sum_{m=-\infty}^{m=\infty} e^{im\phi} J_m(\lambda r) J_m(\lambda R) &= J_0(\lambda r) J_0(\lambda R) + \\ 2 \sum_{m=1}^{m=\infty} \cos(m\phi) J_m(\lambda r) J_m(\lambda R) \end{aligned}$$

Substituindo em 5.4.16:

$$\begin{aligned} \frac{h}{(\sqrt{\rho^2 + h^2})^{\frac{3}{2}}} &= \int_0^\infty e^{-\lambda h} \lambda J_0(\lambda r) J_0(\lambda R) d\lambda + \\ 2 \int_0^\infty e^{-\lambda h} \lambda \sum_{m=1}^{m=\infty} \cos(m\phi) J_m(\lambda r) J_m(\lambda R) \end{aligned}$$

A integral:

$$\begin{aligned} 4\pi \int_0^{R_a} r dr \int_0^\pi d\phi \int_0^{R_d} \frac{h}{(h^2 + r^2 + R^2 - 2rR \cos(\phi))^{\frac{3}{2}}} R dR &= \\ 4\pi^2 \int_0^\infty e^{-\lambda h} \lambda \left(\int_0^{R_a} r J_0(\lambda r) dr \int_0^{R_d} R J_0(\lambda R) dR \right) d\lambda + \\ 8\pi \int_0^\infty e^{-\lambda h} \lambda \left(\sum_{m=1}^{m=\infty} \int_0^\pi \cos(m\phi) d\phi \int_0^{R_a} r J_m(\lambda r) dr \int_0^{R_d} R J_m(\lambda R) dR \right) d\lambda \end{aligned}$$

O segundo termo do segundo membro é igual a zero. Por outro lado:

$$\frac{1}{\lambda^2} \int_0^{R_a} \lambda r J_0(\lambda r) \lambda dr = \frac{R_a}{\lambda} J_1(\lambda R_a)$$

e:

$$\frac{1}{\lambda^2} \int_0^{R_d} \lambda R J_0(\lambda R) \lambda dR = \frac{R_d}{\lambda} J_1(\lambda R_d)$$

e:

$$4\pi \int_0^{R_a} r dr \int_0^\pi d\phi \int_0^{R_d} \frac{h}{(h^2 + r^2 + R^2 - 2rR \cos(\phi))^{\frac{3}{2}}} R dR =$$

$$4\pi^2 R_a R_d \int_0^\infty e^{-\lambda h} \lambda^{-1} J_1(\lambda R_a) J_1(\lambda R_d) d\lambda$$

Substituindo essa integral no cálculo da fração I de partículas que são emitidas pela fonte e que atingem o detector obtém-se a equação 5.2.14.

Capítulo 6

Processos de Markov e a solução de alguns problemas de equações lineares

Transformações lineares, ou operadores lineares, são funções com a forma $T : V \longrightarrow W$ onde V e W são espaços vetoriais, reais ou complexos, que podem ou não coincidir. A transformação é linear se, e só se, dados \mathbf{x}_1 e \mathbf{x}_2 , que tenham, como imagem da transformação $\mathbf{y} = T(\mathbf{x})$, \mathbf{y}_1 e \mathbf{y}_2 , respectivamente, a transformação de uma combinação linear de \mathbf{x}_1 e de \mathbf{x}_2 com a forma:

$$\mathbf{x} = \alpha_1 \mathbf{x}_1 + \alpha_2 \mathbf{x}_2$$

α_1 e α_2 sendo números reais ou complexos, tem como imagem:

$$T(\alpha_1 \mathbf{x}_1 + \alpha_2 \mathbf{x}_2) = \alpha_1 \mathbf{y}_1 + \alpha_2 \mathbf{y}_2$$

Quando o elemento \mathbf{x} é desconhecido e o elemento \mathbf{y} é conhecido e T é uma transformação linear, a expressão:

$$\mathbf{y} = T(\mathbf{x})$$

é uma equação linear. Em muitos casos, o operador T pode ser representado por uma matriz com n linhas e m colunas, o elemento \mathbf{x} pode ser representado por um vetor do espaço V , com m dimensões e o elemento \mathbf{y} por um vetor do espaço W com n dimensões. Em outras situações, uma solução aproximada da equação linear pode ser obtida transformando a equação original em um sistema de equações lineares.

O tema deste capítulo é a solução de alguns problemas lineares que podem ser representados por um sistema de equações lineares cuja matriz satisfaz um conjunto pequeno de condições.

6.1 Processos de Markov

Um processo estocástico, definido para o produto cartesiano do espaço amostral V e um subconjunto T dos números reais, é chamado de processo de Markov se o estado do processo em um instante t_0 condiciona o estado do processo em um

instante posterior $t_1 \geq t_0$, independentemente dos estados do processo em instantes anteriores $t < t_0$, ou seja:

$$P\{X(v, t_1) \leq x_1 \mid X(v, t) \text{ com } t \leq t_0\} = P\{X(v, t_1) \leq x_1 \mid X(v, t_0)\}$$

Isso significa que se o estado do processo estocástico é conhecido em uma sequência de instantes $t_0, t_1, t_2, \dots, t_n, \dots$, tem-se:

$$P\{X(v, t_{n+1}) \leq x_{n+1} \mid X(v, t_n), X(v, t_{n-1}), \dots, X(v, t_0)\} = \\ P\{X(v, t_{n+1}) \leq x_{n+1} \mid X(v, t_n)\}$$

Existem três categorias de processos de Markov:

1. Processos onde o espaço de probabilidades V e o conjunto T são finitos ou infinitos e enumeráveis.
2. Processos onde o espaço amostral V é finito ou infinito e enumerável e o conjunto T é contínuo.
3. Processos onde V e T são não enumeráveis.

A primeira categoria, que tem uma importância particular para o desenvolvimento apresentado neste capítulo, recebe o nome de cadeias de Markov.

6.1.1 Cadeias de Markov

A cadeia de Markov é definida em termos da probabilidade do estado $\{v_i, t_k\}$ onde i e k são fixos:

$$P\{X(v_i, t_k) = a_i\} = p_i(k)$$

e pela probabilidade de transição do estado v_i, t_k para o estado v_j, t_l :

$$\pi_{i,j}(k, l) = P\{\{X(v_j, t_l) = a_j\} \mid \{X(v_i, t_k) = a_i\}\}$$

Como:

$$P\{\{X(v_j, t_l) = a_j\} \mid \{X(v_i, t_k) = a_i\}\} = \frac{P\{\{X(v_j, t_l) = a_j\} \cap \{X(v_i, t_k) = a_i\}\}}{P\{X(v_i, t_k) = a_i\}}$$

e $P\{\{X(v_j, t_l) = a_j\} \cap \{X(v_i, t_k) = a_i\}\}$ é a probabilidade conjunta dos eventos $X(v_i, t_k) = a_i$ e $X(v_j, t_l) = a_j$, a probabilidade marginal de $X(v_i, t_k) = a_i$ é:

$$\sum_j P\{\{X(v_j, t_l) = a_j\} \cap \{X(v_i, t_k) = a_i\}\} = p_i(k)$$

e, por isso:

$$\sum_j \pi_{i,j}(k, l) = 1 \quad (6.1.1)$$

A cadeia de Markov é chamada de homogênea quando as probabilidades de transição não dependem dos tempos t_l e t_k , mas apenas da diferença $\delta t = t_k - t_l$.

Sendo $\mathbf{norma} - \mathbf{m} \geq 1$ e $\mathbf{norma} - \mathbf{l} < 1$, uma forma de definir os fatores $v_{i,j}$ é escrever:

$$\alpha_{i,j} = \frac{\mathbf{norma} - \mathbf{m}}{\mathbf{norma} - \mathbf{l}} \frac{\alpha_{i,j}}{|\alpha_{i,j}|} \pi_{i,j}$$

ou:

$$\pi_{i,j} = \frac{\mathbf{norma} - \mathbf{l}}{\mathbf{norma} - \mathbf{m}} |\alpha_{i,j}|$$

A soma em j de $\pi_{i,j}$ fica sendo:

$$\sum_{j=1}^n \pi_{i,j} = \frac{\mathbf{norma} - \mathbf{l}}{\mathbf{norma} - \mathbf{m}} \sum_{j=1}^n |\alpha_{i,j}|$$

Isso significa que:

$$\max_i \sum_{j=1}^n \pi_{i,j} = \frac{\mathbf{norma} - \mathbf{l}}{\mathbf{norma} - \mathbf{m}} \max_i \sum_{j=1}^n |\alpha_{i,j}| = \mathbf{norma} - \mathbf{l} < 1$$

Portanto, no caso da $\mathbf{norma} - \mathbf{m}$ ser igual ou superior a 1 e a $\mathbf{norma} - \mathbf{l}$ ser inferior a 1, os fatores $v_{i,j}$ podem ser definidos como:

$$v_{i,j} = \frac{\mathbf{norma} - \mathbf{m}}{\mathbf{norma} - \mathbf{l}} \frac{\alpha_{i,j}}{|\alpha_{i,j}|}$$

No caso da $\mathbf{norma} - \mathbf{m}$ ser igual ou superior a 1 e a $\mathbf{norma} - \mathbf{k}$ ser inferior a 1, os fatores $v_{i,j}$ podem ser definidos como:

$$v_{i,j} = \frac{\mathbf{norma} - \mathbf{m}}{\mathbf{norma} - \mathbf{k}} \frac{\alpha_{i,j}}{|\alpha_{i,j}|}$$

Pode-se definir também os termos adicionais:

$$\pi_{i,n+1} = 1 - \sum_{j=1}^n \pi_{i,j}$$

e $\pi_{n+1,j} = 0$ para $j < n+1$, e ainda $\pi_{n+1,n+1} = 1$.

Uma matriz $\mathbf{\Pi}$ $(n+1) \times (n+1)$, associada ao sistema 6.2.2, pode ser composta na forma:

$$\mathbf{\Pi} = \begin{bmatrix} \pi_{1,1} & \pi_{1,2} & \cdots & \pi_{1,n} & \pi_{1,n+1} \\ \pi_{2,1} & \pi_{2,2} & \cdots & \pi_{2,n} & \pi_{2,n+1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \pi_{n,1} & \pi_{n,2} & \cdots & \pi_{n,n} & \pi_{n,n+1} \\ \pi_{n+1,1} & \pi_{n+1,2} & \cdots & \pi_{n+1,n} & \pi_{n+1,n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \pi_{1,1} & \pi_{1,2} & \cdots & \pi_{1,n} & \pi_{1,n+1} \\ \pi_{2,1} & \pi_{2,2} & \cdots & \pi_{2,n} & \pi_{2,n+1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \pi_{n,1} & \pi_{n,2} & \cdots & \pi_{n,n} & \pi_{n,n+1} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (6.2.3)$$

Note que, como no caso da equação 6.1.1:

$$\sum_{j=1}^{n+1} \pi_{i,j} = 1$$

6.2.2 O experimento aleatório

Considere agora o seguinte experimento aleatório. Uma partícula se move ao acaso ocupando, uma por vez, um número finito de posições diferentes

$$\{S_1, S_2, S_3, \dots, S_n, S_{n+1}\}$$

A passagem da posição S_i para a posição S_j independe das posições anteriormente ocupadas e não vincula as posições posteriores. A probabilidade dessa troca de posições é $\pi_{i,j}$, $j = 1, 2, \dots, n, n+1$. Quando a partícula atinge a posição S_{n+1} ela lá permanece e, por isso, essa posição é chamada de fronteira ou barreira absorvente.

Isso significa que $\pi_{n+1,j}$ é nulo para $j = 1, 2, \dots, n$ e $\pi_{n+1,n+1}$ é igual a 1. O processo de passagem de uma posição para outra é uma cadeia de Markov, discreta, finita e homogênea, porque nesse caso não depende explicitamente do tempo. A matriz, cujos elementos correspondem à transição de um estado da cadeia para outro, é chamada de cadeia de transição de estados, ou lei da cadeia de Markov.

A lei da cadeia de Markov que representa o experimento aleatório descrito tem a mesma estrutura e as mesmas propriedades da matriz Π definida na equação 6.2.3 que é associada ao sistema 6.2.2, muito embora o significado das matrizes sejam diferentes.

Uma partícula ocupa inicialmente uma posição S_i qualquer, desde que não seja a fronteira, e ao final de $m+1$ transições atinge a barreira absorvente. Para exemplificar, suponha que a posição inicial seja S_3 , o que pode ser chamado de estado S_{3_0} . A sequência de transições, ou trajetória, para estados subsequentes S_{3_k} , que podem ser qualquer uma das posições do conjunto $\{S_1, S_2, S_3, \dots, S_n\}$ e termina em $S_{3_{m+1}} = S_{n+1}$ é:

$$T_3^p \{S_{3_0}, S_{3_1}, S_{3_2}, \dots, S_{3_m}, S_{3_{m+1}}\} =$$

$$\{(S_3 = S_{3_0} \rightarrow S_{3_1}); (S_{3_1} \rightarrow S_{3_2}); \dots; (S_{3_{m-1}} \rightarrow S_{3_m}); (S_{3_m} \rightarrow S_{3_{m+1}} = S_{n+1})\}$$

onde o índice superior p indica que se trata de uma trajetória particular entre muitas outras trajetórias possíveis.

As transições que compõem a trajetória T_3^p são estatisticamente independentes, uma vez que a transição $S_{3_k} \rightarrow S_{3_{k+1}}$ depende apenas da posição S_{3_k} e essa posição nem tem nenhuma influência sobre as transições posteriores. Portanto, a probabilidade associada à trajetória T_3^p é:

$$P\{T_3^p\} = \pi_{3_0,3_1} \times \pi_{3_1,3_2} \times \pi_{3_2,3_3} \times \dots \times \pi_{3_{m-1},3_m} \times \pi_{3_m,3_{m+1}} \quad (6.2.4)$$

Expressões análogas à equação 6.2.4 podem ser escritas para trajetórias que se iniciem em qualquer uma das posições S_j com $j = 1, 2, \dots, n$.

É importante notar que, se uma transição $S_i \rightarrow S_j$ qualquer tiver probabilidade de transição nula, a probabilidade das trajetórias que incluem essa transição é nula.

6.2.3 A conexão entre o sistema a ser resolvido e o experimento aleatório - funcionais de trajetória

O experimento utilizado na solução de um sistema de n equações lineares com n incógnitas é o movimento ao acaso de uma partícula que tem como espaço amostral um conjunto de $n+1$ posições, ou estados, $\{S_1, S_2, S_3, \dots, S_n, S_{n+1}\}$ onde S_{n+1} é a fronteira absorvente. Pode-se imaginar que as posições ocupadas pelas partículas correspondam às colunas da matriz aumentada do sistema:

$$\begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,n} & b_1 \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,n} & b_2 \\ a_{3,1} & a_{3,2} & \cdots & a_{3,n} & b_3 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n,1} & a_{n,2} & \cdots & a_{n,n} & b_n \end{bmatrix}$$

Nessa interpretação, a barreira absorvente corresponde à última coluna dessa matriz. Considerando que a posição inicial de uma partícula seja S_i , existe um conjunto de trajetórias $T_i^p(S_{i_0}, S_{i_1}, S_{i_2}, \dots, S_{i_m}, S_{i_{m+1}})$ com $m+1$ posições e onde $S_{i_{m+1}}$ é o ponto de fronteira. As trajetórias são associadas às incógnitas do sistema. À incógnita x_1 se associam as trajetórias que têm início na primeira linha do sistema e na posição S_1 que corresponde à primeira coluna. À incógnita x_j se associam as trajetórias que têm início na j -ésima linha na posição correspondente à j -coluna da matriz. A forma como se traça uma trajetória particular será descrita a seguir.

Considere, para exemplificar, um experimento aleatório associado a um sistema de 9 equações lineares a 9 incógnitas. O conjunto de posições possíveis é:

$$\{S_1, S_2, S_3, S_4, S_5, S_6, S_7, S_8, S_9, S_{10} = \text{fronteira absorvente}\}$$

e uma trajetória particular com início em S_3 e com cinco transições até a fronteira absorvente é:

$$\begin{aligned} T_3^p = \{ & (S_3 = s_{3_0} \rightarrow S_{3_1} = S_7); (S_7 = s_{3_1} \rightarrow S_{3_2} = S_5); \\ & (S_5 = s_{3_2} \rightarrow S_{3_3} = S_1); (S_1 = s_{3_3} \rightarrow S_{3_4} = S_1); (S_1 = s_{3_4} \rightarrow S_{3_5} = S_{10}) \} \end{aligned} \quad (6.2.5)$$

Nesse esquema a partícula associada à incógnita x_3 ocupa inicialmente a terceira coluna. Como a partícula está associada a x_3 as trajetórias se iniciam na terceira linha. Na primeira transição a partícula sai da posição correspondente à terceira coluna e cai ao acaso na posição correspondente à sétima coluna. Na segunda transição a partícula sai da sétima posição e ocupa, dirigida pelo acaso, a quinta coluna. Da quinta posição a partícula passa para a primeira posição, e assim por diante, até atingir a décima coluna da matriz aumentada do sistema que corresponde à barreira absorvente.

Além a trajetória descrita acima existem outras onze trajetórias partindo de S_3 e ocupando com diferentes ordenações as mesmas cinco posições. As trajetórias particulares T_3^p que têm início no ponto S_3 formam, na realidade, um conjunto infinito e enumerável $T_3 = \{T_3^p\}$, uma vez que não existe limitação imposta ao comprimento da trajetória. O comprimento pode ser qualquer número natural.

A cada trajetória particular pertencente ao conjunto $\{T_i^p\}$, por exemplo, $T_i^p = \{S_{i_0}, S_{i_1}, S_{i_2}, \dots, S_{i_m}, S_{i_{m+1}}\}$, com m transições que terminam em $S_{i_{m+1}} = S_{n+1}$, pode ser associada uma variável aleatória, algumas vezes chamada de funcional da

trajetória , com a forma:

$$X(T_i^p) = \beta_{i_0} + v_{i_0,i_1}\beta_{i_1} + v_{i_0,i_1}v_{i_1,i_2}\beta_{i_2} \\ + v_{i_0,i_1}v_{i_1,i_2}v_{i_2,i_3}\beta_{i_3} + \cdots + v_{i_0,i_1}v_{i_1,i_2}v_{i_2,i_3}\cdots v_{i_{m-1},i_m}\beta_{i_m}$$

onde os coeficientes β_{i_j} , com $j = 1, 2, \dots, m$, são extraídos do vetor constante $[\beta_1, \beta_2, \beta_3, \dots, \beta_n]^T$ do sistema a ser resolvido. A constante $\beta_{i_0} = \beta_{i_1}$, onde S_{i_0} é a posição onde a trajetória se inicia, $\beta_{i_1} = \beta_{j_1}$, sendo S_{j_1} a segunda posição da trajetória, $\beta_{i_2} = \beta_{k_2}$, S_{k_2} sendo a terceira posição da trajetória, e assim por diante. Note que a trajetória pode incluir a transição da partícula de uma posição S_i para a mesma posição, o que significa ficar na mesma posição. A probabilidade desse evento particular é $\pi_{i,i}$.

Para exemplificar, o funcional associado à trajetória particular T_3^p descrita na equação 6.2.5 é:

$$X(T_3^p) = \beta_{3_0} + v_{3_0,3_1}\beta_{3_1} + v_{3_0,3_1}v_{3_1,3_2}\beta_{3_2} + \\ v_{3_0,3_1}v_{3_1,3_2}v_{3_2,3_3}\beta_{3_3} + v_{3_0,3_1}v_{3_1,3_2}v_{3_2,3_3}v_{3_3,3_4}\beta_{3_4}$$

ou, identificando as posições:

$$X(T_3^p) = \beta_3 + v_{3,7}\beta_7 + v_{3,7}v_{7,5}\beta_5 + v_{3,7}v_{7,5}v_{5,1}\beta_1 + v_{3,7}v_{7,5}v_{5,1}v_{1,1}\beta_1$$

O funcional adotado tem a forma da linha 3 equação 6.7.19, que aparece no apêndice 1 e que corresponde à incógnita x_3 , com a soma truncada em $k = 5$, sendo que apenas o coeficiente da matriz **ALFA** correspondente a cada transição é incluído. Na transição de S_3 para S_7 só o termo $\alpha_{3,7}$ é incluído, como se todos os outros fossem nulos, na transição de S_7 para S_5 só termo $\alpha_{7,5}$ é incluído e assim por diante. O funcional definido dessa forma traça a trajetória seguida pela partícula, ou seja, identifica os vários estados que a partícula ocupa antes de atingir a barreira absorvente. Note que em qualquer situação, o funcional correspondente ao estado S_j corresponde sempre à j - ésima linha do sistema. Ou seja as trajetórias podem ser interpretadas como movimentos ao longo das linhas do sistema.

Escrevendo o funcional na forma descrita, a transição do estado S_i para o estado S_j depende só do estado S_i e, com isso, a simulação do processo de movimento ao acaso mantém a característica de um processo de Markov. Esse é o vínculo entre o método estocástico que está sendo desenvolvido com o método das aproximações sucessivas.

As trajetórias que começam com a mesma posição S_i podem ser agrupadas em classes ou tipos $\{T_{i,j}^p\}$, onde as trajetórias individuais têm a forma:

$$T_{i,1}^p = \{S_i, S_1, S_{i_2}, \dots, S_{i_{m_1+1_P}}\} \\ T_{i,2}^p = \{S_i, S_2, S_{i_2}, \dots, S_{i_{m_2+1_P}}\} \\ T_{i,3}^p = \{S_i, S_3, S_{i_2}, \dots, S_{i_{m_3+1_P}}\} \\ \dots \\ T_{i,j}^p = \{S_i, S_j, S_{i_2}, \dots, S_{i_{m_j+1_P}}\} \\ \dots \\ T_{i,n}^p = \{S_i, S_n, S_{i_2}, \dots, S_{i_{m_n+1_P}}\} \\ T_{i,n+1}^p = \{S_i, S_{n+1}\}$$

Cada classe tem um número grande de membros, com a exceção do grupo $T_{i,n+1}^p$ que corresponde à transição de S_i direto para a fronteira absorvente S_{n+1} .

O funcional da trajetória $X(T_{i,j}^p)$ se escreve:

$$X(T_{i,j}^p) = \beta_i + v_{i,j}\beta_j + v_{i,j}v_{j,i_2}\beta_{i_2} \\ + v_{i,j}v_{j,i_2}v_{i_2,i_3}\beta_{i_3} + \cdots + v_{i,j}v_{j,i_2}v_{i_2,i_3}\cdots v_{i_{m-1},i_m}\beta_{i_m}$$

ou:

$$X(T_{i,j}^p) = \beta_i + v_{i,j}(\beta_j + v_{j,i_2}\beta_{i_2} + v_{j,i_2}v_{i_2,i_3}\beta_{i_3} + \cdots + v_{j,i_2}v_{i_2,i_3}\cdots v_{i_{m-1},i_m}\beta_{i_m})$$

ou ainda:

$$X(T_{i,j}^p) = \beta_i + v_{i,j}T_j^p \quad (6.2.6)$$

No caso extremo de $T_{i,n+1}$, $X(T_{i,n+1}) = \beta_i$. A probabilidade de uma transição particular $T_{i,j}^p$ pertencer à classe $\{T_{i,j}^p\}$ é igual à probabilidade da primeira transição de todas as $T_{i,j}^p$, ou seja, $\pi_{i,j}$. Isso significa que:

$$P(T_{i,j}^p) = \pi_{i,j} \times P(T_j^p) \quad (6.2.7)$$

A esperança matemática de $\{T_i^p\}$ é:

$$E\{T_i^p\} = \sum_{\{T_i^p\}} X(T_i^p)P(T_i^p) = \sum_{j=1}^{n+1} \sum_{\{T_{i,j}^p\}} X(T_{i,j}^p)P(T_{i,j}^p) \quad (6.2.8)$$

Se uma trajetória particular T_i^p contiver uma transição entre estados com probabilidade nula, a probabilidade da trajetória é nula e ela não contribui para o valor $E\{T_i^p\}$. Por isso a atribuição de um valor de $v_{i,j}$ a uma transição com probabilidade nula é irrelevante. Qualquer valor pode ser atribuído.

Pode-se demonstrar que, se uma norma canônica da matriz **ALFA** for menor do que um, as variáveis aleatórias $X(T_i^p)$ têm esperanças matemáticas finitas [5].

6.2.4 A existência de uma solução associada ao experimento aleatório

Teorema 6.1. *Supondo que as esperanças matemáticas $E\{X(T_i^p)\}$ existam e sejam finitas para todos $i = 1, 2, \dots, n$, o vetor \vec{x}_s definido como:*

$$\vec{x}_s = \begin{bmatrix} x_{s_1} \\ x_{s_2} \\ x_{s_3} \\ \vdots \\ x_{s_n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E\{X(T_1^p)\} \\ E\{X(T_2^p)\} \\ E\{X(T_3^p)\} \\ \vdots \\ E\{X(T_n^p)\} \end{bmatrix}$$

é solução de:

$$\vec{x}_s = \mathbf{ALFA} \vec{x}_s + \vec{\beta}$$

com **ALFA** e $\vec{\beta}$ definidos tal como na equação 6.2.2.

Demonstração: Na equação 6.2.8, a cada $T_{i,j}^p$ corresponde uma única trajetória particular T_j^p . O inverso também é verdade. Dada uma trajetória particular T_j^p

existe uma única trajetória particular $T_{i,j}^p$ associada, de forma que a soma sobre $\{T_{i,j}^p\}$ pode ser substituída pela soma sobre $\{T_j^p\}$. Nesse caso, usando as equações 6.2.6 e 6.2.7, a equação 6.2.8 pode ser reescrita como:

$$E\{T_i^p\} = \beta_i \pi_{i,n+1} + \sum_{j=1}^n \sum_{\{T_j^p\}} (\beta_j + v_{i,j} X(T_j^p)) P(T_{i,j}^p)$$

ou;

$$E\{T_i^p\} = \beta_i \pi_{i,n+1} + \sum_{j=1}^n \sum_{\{T_j^p\}} (\beta_j + v_{i,j} X(T_j^p)) \times \pi_{i,j} P(T_j^p)$$

Reorganizando essa equação, tem-se:

$$\begin{aligned} E\{T_i^p\} &= \beta_i \left(\pi_{i,n+1} + \sum_{j=1}^n \pi_{i,j} \sum_{\{T_j^p\}} P(T_j^p) \right) \\ &\quad + \sum_{j=1}^n \pi_{i,j} v_{i,j} \sum_{\{T_j^p\}} X(T_j^p) P(T_j^p) \end{aligned}$$

Como:

$$\sum_{\{T_j^p\}} P(T_j^p) = 1$$

o que faz com que:

$$\sum_{j=1}^n \pi_{i,j} \sum_{\{T_j^p\}} P(T_j^p) + \pi_{i,n+1} = \sum_{j=1}^{n+1} \pi_{i,j} = 1$$

e, além disso:

$$E\{X(T_j^p)\} = \sum_{\{T_j^p\}} X(T_j^p) P(T_j^p), \text{ para } j = 1, 2, \dots, n$$

tem-se que:

$$E\{X(T_i^p)\} = \beta_i + \sum_{j=1}^n \pi_{i,j} v_{i,j} E\{X(T_j^p)\}$$

Lembrando que $\alpha_{i,j} = \pi_{i,j} v_{i,j}$ conclui-se que:

$$E\{X(T_i^p)\} = \beta_i + \sum_{j=1}^n \alpha_{i,j} E\{X(T_j^p)\}$$

■

6.2.5 Observações

Antes de encerrar esta seção, convém lembrar três detalhes importantes do desenvolvimento que foi feito. O primeiro detalhe importante é que, para que o método desenvolvido leve a uma solução do sistema 6.2.2, é condição suficiente que uma norma canônica da matriz **ALFA** seja menor do que um. O segundo detalhe importante é a definição do funcional das trajetórias, cujo valor é determinado pela forma das diferentes aproximações sucessivas no método iterativo, cancelando-se os termos correspondentes às transformações que não ocorrem. Uma definição que, para os autores, parece estar muito longe de ser evidente. O terceiro ponto importante é a existência de esperanças matemáticas finitas $E\{X(T_i^p)\}$ para $i = 1, 2, \dots, n$, que é garantida quando uma norma canônica da matriz **ALFA** é inferior a um.

6.3 A aplicação prática da solução proposta

A solução de um sistema de n equações lineares a n incógnitas, $\mathbf{A} \vec{x} = \vec{b}$, depende agora de se estabelecer um procedimento para gerar o movimento aleatório da partícula através das n posições, ou estados:

$$\{S_1, S_2, S_3, \dots, S_n, S_{n+1}\}$$

da cadeia de Markov. O procedimento começa com a transcrição do sistema para a forma de solução iterativa $\vec{x} = \mathbf{ALFA} \vec{x} + \vec{\beta}$, com a construção da matriz de transição entre os estados e da definição dos parâmetros $v_{i,j}$.

O movimento aleatório da partícula é induzido da seguinte forma. Começando com a incógnita x_1 , na posição S_1 , define-se o primeiro termo do funcional da trajetória $X(T_1^1)$ como sendo β_1 . Em seguida é feita extração de um valor z de uma distribuição uniforme no intervalo $(0, 1]$ e esse valor é comparado com as probabilidades de transição da posição S_1 para as outras posições S_j , com $j = 1, 2, \dots, n, n+1$, seguindo o esquema de perguntas e respostas:

1. A variável aleatória z está no intervalo $0 \leq z < \pi_{1,1}$? Se estiver, a partícula permanece na posição S_1 e ao funcional $X(T_1^1)$ se adiciona o termo $v_{1,1}\beta_1$. Se não estiver nesse intervalo passa-se à segunda pergunta:
2. A variável aleatória z está no intervalo $\pi_{1,1} \leq z < \pi_{1,1} + \pi_{1,2}$? Se estiver, a partícula passa para a posição S_2 e ao funcional $X(T_1^1)$ se adiciona o termo $v_{1,2}\beta_2$. Se não estiver nesse intervalo passa-se à terceira pergunta:
3. A variável aleatória z está no intervalo $\pi_{1,1} + \pi_{1,2} \leq z < \pi_{1,1} + \pi_{1,2} + \pi_{1,3}$? Se estiver, a partícula passa para a posição S_3 e ao funcional $X(T_1^1)$ se adiciona o termo $v_{1,3}\beta_3$. Se não estiver nesse intervalo passa-se à pergunta seguinte na ordem que vem sendo seguida.
4. O processo continua e, eventualmente, se não houver mudança para uma posição intermediária, chega-se ao estado S_{n+1} , a trajetória T_1^1 termina e, nesse caso, o funcional $X(T_1^1)$ fica inalterado no valor β_1 .

A qualquer instante a partícula pode mudar de posição, por exemplo, logo na primeira extração da variável aleatória z , a partícula pode passar para a posição S_3 , e, nesse caso, o funcional da trajetória fica sendo $X(T_1^1) = \beta_1 + v_{1,3}\beta_3$. Com a partícula na posição S_3 , uma nova extração da variável aleatória z é feita a sequência de perguntas e decisões recomeça:

1. A variável aleatória z está no intervalo $0 \leq z < \pi_{3,1}$? Se estiver, a partícula passa para a posição S_1 e ao funcional $X(T_1^1)$ se adiciona o termo $v_{1,3}v_{3,1}\beta_1$. Se não estiver nesse intervalo passa-se à segunda pergunta:
2. A variável aleatória z está no intervalo $\pi_{3,1} \leq z < \pi_{3,1} + \pi_{3,2}$? Se estiver, a partícula passa para a posição S_2 e ao funcional $X(T_1^1)$ se adiciona o termo $v_{1,3}v_{3,2}\beta_2$. Se não estiver nesse intervalo passa-se à terceira pergunta:

3. A variável aleatória z está no intervalo $\pi_{3,1} + \pi_{3,2} \leq z < \pi_{3,1} + \pi_{3,2} + \pi_{3,3}$? Se estiver, a partícula permanece na posição S_3 e ao funcional $X(T_1^1)$ se adiciona o termo $v_{1,3}v_{3,3}\beta_3$. Se não estiver nesse intervalo passa-se à pergunta seguinte na ordem que vem sendo seguida.
4. O processo continua e, eventualmente, se não houver mudança para uma posição intermediária, chega-se ao estado S_{n+1} , a trajetória T_1^1 termina e nesse caso o funcional $X(T_1^1)$ permanece no valor $\beta_1 + v_{1,3}\beta_3$.

Antes de atingir o estado S_{n+1} a partícula pode mudar para a posição S_j e, nesse caso $X(T_1^1) = \beta_1 + v_{1,3}\beta_3 + v_{1,3}v_{3,j}\beta_j$, e o processo de perguntas e decisões recomeça dessa posição e:

1. A variável aleatória z está no intervalo $0 \leq z < \pi_{j,1}$? Se estiver, a partícula passa para a posição S_1 e ao funcional $X(T_1^1)$ se adiciona o termo $v_{1,3}v_{3,j}v_{j,1}\beta_1$. Se não estiver nesse intervalo passa-se à segunda pergunta:
2. A variável aleatória z está no intervalo $\pi_{j,1} \leq z < \pi_{j,1} + \pi_{j,2}$? Se estiver, a partícula passa para a posição S_2 e ao funcional $X(T_1^1)$ se adiciona o termo $v_{1,3}v_{3,j}v_{j,2}\beta_2$. Se não estiver nesse intervalo passa-se à terceira pergunta:
3. A variável aleatória z está no intervalo $\pi_{j,1} + \pi_{j,2} \leq z < \pi_{j,1} + \pi_{j,2} + \pi_{j,3}$? Se estiver, a partícula permanece na posição S_3 e ao funcional $X(T_1^1)$ se adiciona o termo $v_{1,3}v_{3,j}v_{j,3}\beta_3$. Se não estiver nesse intervalo passa-se à pergunta seguinte na ordem que vem sendo seguida.
4. O processo continua e, eventualmente, se não houver mudança para uma posição intermediária, chega-se ao estado S_{n+1} , a trajetória T_1^1 termina e nesse caso o funcional $X(T_1^1)$ permanece no valor $\beta_1 + v_{1,3}v_{3,j}\beta_j$.

O processo se repete até que, em alguma transição entre estados, o estado de fronteira, ou barreira absorvente é atingido. No momento em que a barreira absorvente for atingida a trajetória T_1^1 termina. Para se estimar a esperança matemática dos funcionais $\{X(T_1^p)\}$ um número grande N de trajetórias T_1^p , com $p = 1, 2, \dots, N$, com início em S_1 é simulado. O valor médio dessas simulações é atribuído a $E\{X(T_1^p)\}$ e o erro padrão da média das trajetórias individuais é atribuído à incerteza da estimativa de $E\{X(T_1^p)\}$.

Note que, se uma transição $S_i \rightarrow S_j$ tiver uma probabilidade de transição nula, o processo de movimentação da partícula continua como se essa transição não existisse. Ou seja, o processo exclui a trajetória com a transição $S_i \rightarrow S_j$ proibida.

Estabelecida uma estimativa de $E\{X(T_1^p)\}$, passa-se a estabelecer uma estimativa de $E\{X(T_2^p)\}$ seguindo o mesmo procedimento e o processo se estende até a estimativa da última incógnita x_n .

6.4 Exemplos de aplicação

Nesta seção serão apresentados três exemplos de aplicação. O primeiro corresponde à solução de um sistema de equações, o segundo corresponde à solução aproximada

de uma equação integral e o terceiro corresponde à solução da equação de condução de calor em estado estacionário. Os três exemplos são extremamente simples e, de novo, ninguém com um mínimo de bom senso, usaria o método de Monte Carlo para resolvê-los. No entanto, os exemplos servem para mostrar de forma simples a aplicação da técnica desenvolvida neste capítulo.

6.4.1 Solução de um sistema de equações lineares

O sistema a ser resolvido¹ é:

$$\begin{aligned}
 10,04x_1 - 0,06x_2 + 0,03x_3 - 0,05x_4 + 0,06x_5 - 0,04x_6 &= 9,98 \\
 -0,06x_1 + 9,96x_2 - 0,02x_3 + 0,11x_4 - 0,08x_5 + 0,15x_6 &= 10,06 \\
 0,03x_1 - 0,02x_2 + 10,10x_3 + 0,15x_4 + 0,12x_5 + 0,07x_6 &= 10,45 \\
 -0,05x_1 + 0,11x_2 + 0,15x_3 + 10,12x_4 + 0,03x_5 + 0,02x_6 &= 10,38 \\
 0,06x_1 - 0,08x_2 + 0,12x_3 + 0,03x_4 + 9,90x_5 - 0,03x_6 &= 10,00 \\
 -0,04x_1 + 0,15x_2 + 0,07x_3 + 0,02x_4 - 0,03x_5 + 9,95x_6 &= 10,12
 \end{aligned} \tag{6.4.9}$$

Escrevendo na forma apropriada para uma solução pelo método iterativo:

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,994 \\ 1,010 \\ 1,035 \\ 1,026 \\ 1,010 \\ 1,017 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0,006 & -0,003 & 0,005 & -0,006 & 0,004 \\ 0,006 & 0 & 0,002 & -0,011 & 0,008 & -0,015 \\ -0,003 & 0,002 & 0 & -0,015 & -0,012 & -0,007 \\ 0,005 & -0,011 & -0,015 & 0 & -0,003 & -0,002 \\ -0,006 & 0,008 & -0,012 & -0,003 & 0 & 0,003 \\ 0,004 & -0,015 & -0,007 & -0,002 & 0,003 & 0 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{bmatrix} \tag{6.4.10}$$

A **norma-m** da matriz **ALFA** é 0,042.

Usando um programa que gera as cadeias de Markov seguindo o procedimento descrito na seção 6.3, a solução do sistema 6.4.10 é:

$$\begin{aligned}
 x_1 &= 0,9990 \pm 0,0016 \\
 x_2 &= 0,9977 \pm 0,0021 \\
 x_3 &= 0,9987 \pm 0,0020 \\
 x_4 &= 0,9981 \pm 0,0019 \\
 x_5 &= 0,9990 \pm 0,0019 \\
 x_6 &= 1,0000 \pm 0,0018
 \end{aligned}$$

O número de iterações para calcular cada incógnitas x_i foi de 10.000, cada incógnita foi calculada uma única vez e a incerteza apresentada corresponde a um erro padrão da média das 10.000 iterações. O cálculo de cada incógnita foi, então, repetido dez vezes para diminuir a variância do resultado. Os valores obtidos foram:

¹o exemplo foi extraído de [13]

$$\begin{aligned}
x_1 &= 0,999666 \pm 0,000099 \\
x_2 &= 0,99815 \pm 0,00028 \\
x_3 &= 0,99887 \pm 0,00020 \\
x_4 &= 0,99880 \pm 0,00047 \\
x_5 &= 0,9989380 \pm 0,0000091 \\
x_6 &= 0,999224 \pm 0,000078
\end{aligned}$$

O valor de cada incógnita corresponde agora à média das dez repetições e a incerteza corresponde a um erro padrão da média das dez repetições. A solução desse sistema é $[1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1]^T$. Como antes o índice T indica a operação de transposição.

Uma ideia da exatidão do cálculo pode ser obtida substituindo os valores calculados das incógnitas no sistema original 6.4.10 e comparar com o termo independente de cada equação. No caso do cálculo de cada incógnita feito uma única vez, os resultados foram:

$$\begin{aligned}
b_1 &= 9,9700 \pm 0,0016 \\
b_2 &= 10,0371 \pm 0,0021 \\
b_3 &= 10,4365 \pm 0,0020 \\
b_4 &= 10,3603 \pm 0,0019 \\
b_5 &= 9,9900 \pm 0,0019 \\
b_6 &= 10,1196 \pm 0,0018
\end{aligned}$$

onde as incertezas foram calculadas propagando as incertezas de cada estimativa das incógnitas, supondo que as estimativas não sejam correlacionadas. As diferenças geradas são:

$$\begin{aligned}
b_1 - 9,98 &= -0,0100 \pm 0,0016 = -6,2 \times \text{o erro padrão da média} \\
b_2 - 10,06 &= -0,0229 \pm 0,0021 = -10,9 \times \text{o erro padrão da média} \\
b_3 - 10,45 &= -0,0135 \pm 0,0020 = -6,8 \times \text{o erro padrão da média} \\
b_4 - 10,38 &= -0,0197 \pm 0,0019 = -10,3 \times \text{o erro padrão da média} \\
b_5 - 10,00 &= -0,0100 \pm 0,0019 = -5,3 \times \text{o erro padrão da média} \\
b_6 - 10,12 &= -0,0004 \pm 0,0018 = -0,2 \times \text{o erro padrão da média}
\end{aligned}$$

Considerando que essas estimativas possam ser consideradas, em primeira aproximação, como normalmente distribuídas em torno do valor médio, a hipótese nula de que o valor seja uma estimativa do valor esperado, foi rejeitada com um nível de significância máximo de 0,05, com a única exceção da componente b_6 . Isso significa que, embora aparentemente os valores estimados das incógnitas x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 e x_6 sejam próximos das soluções reais, a exatidão da solução é pobre.

O mesmo cálculo poderia ser repetido utilizando a estimativa mais precisa e, nesse caso os desvios entre os valores estimados e os valores reais seriam ainda mais significativos, indicando de forma mais clara a exatidão ruim do solução.

Uma possibilidade para essa exatidão ruim, que sempre deve ser considerada é a qualidade do código que gera a sequência de números aleatórios. Nesse exemplo, como em todos os outros exemplos do livro, o código utilizado é o descrito no capítulo 4, que é baseado no algoritmo de Bayes e Durham associado à fórmula de congruência de Lehmer. O algoritmo foi submetido a uma série de testes e utilizado no cálculo dos exemplos de integração por Monte Carlo sem sugerir que houvesse algum problema. De qualquer forma, essa possibilidade só pode ser analisada se um outro código gerador de números aleatórios for utilizado. Essa tarefa fica para a lista de exercícios.

O leitor atento deve ter notado que o método proposto para a solução de sistemas lineares tem uma utilização aparentemente muito restrita, uma vez que se baseia no método das aproximações sucessivas, com a restrição importante sobre a norma canônica da matriz **ALFA** dos sistemas. Essa limitação, no entanto, é de fato aparente, uma vez que, qualquer sistema cuja matriz **A** tenha determinante diferente de zero pode ser escrito na forma própria para o uso do método iterativo.

A demonstração disso é simples. Considere o sistema:

$$\mathbf{A} \vec{x} = \vec{b}$$

Multiplicando o sistema à esquerda por $(\mathbf{A}^{-1} - \mathbf{E})$, onde **E** é uma matriz com elementos $\varepsilon_{i,j}$ pequenos em módulo, tem-se:

$$(\mathbf{A}^{-1} - \mathbf{E})\mathbf{A} \vec{x} = (\mathbf{A}^{-1} - \mathbf{E})\vec{b}$$

ou:

$$\vec{x} = (\mathbf{A}^{-1} - \mathbf{E})\vec{b} + \mathbf{E}\mathbf{A} \vec{x}$$

Se os elementos $\varepsilon_{i,j}$ forem feitos suficientemente pequenos, a matriz **ALFA** associada a esse sistema transformado satisfaz as condições suficientes para a convergência do processo iterativo.

A demonstração, por si só, não sugere uma forma prática de se transformar o sistema. No entanto, o sistema original pode ser posto na forma própria para o método iterativo através de uma sequência de transformações elementares sobre as equações do sistema.

A técnica consiste em localizar, quando existirem, as equações em que os coeficientes correspondentes à diagonal da matriz do sistema sejam maiores, em módulo, do que a soma dos módulos dos demais coeficientes. Em seguida se combinam linearmente as equações do sistema original para gerar as equações que faltam para completar o sistema transformado, de forma que os elementos diagonais sejam maiores em módulo do que a soma dos módulos dos demais coeficientes. É importante que as equações do sistema original que não têm o módulo do coeficiente do termo diagonal maior do que a soma dos módulos dos outros coeficientes sejam utilizadas pelo menos em uma das combinações.

6.4.2 Solução de uma equação integral

Uma equação integral é qualquer expressão com a forma:

$$u(x) = f(x) + \lambda \int_{a(x)}^{b(x)} K(x, t) u(t) dt$$

onde a função $u(t)$ que aparece sendo integrada é desconhecida, os limites de integração $a(x)$ e $b(x)$ podem ser fixos ou variáveis e a integração pode ser própria ou imprópria. A função $K(x, t)$ é uma função conhecida de x e de t e recebe o nome de núcleo da equação integral, f é uma função conhecida e λ é um parâmetro numérico.

Por exemplo a equação:

$$F(s) = \int_0^\infty e^{-st} f(t) dt$$

onde F é conhecida e f é desconhecida é um tipo muito particular de equação integral que aparece na teoria da transformada de Laplace.

A solução da equação integral consiste em encontrar a função que torna a equação integral uma identidade. Existem vários tipos de equações integrais e um grande número de técnicas de solução, mas o tratamento detalhado desse tipo de problema está fora do propósito destas notas. Um leitor interessado pode consultar, por exemplo, [11], [18] e [3].

O problema aqui consiste em resolver a equação de Fredholm de segunda espécie e não homogênea:

$$u(x) = f(x) + \lambda \int_a^b K(x, t)u(t)dt \quad (6.4.11)$$

onde a integração é feita em um intervalo fixo (a, b) .

A forma mais simples de se resolver numericamente uma equação desse tipo é substituir a integral definida por uma fórmula de integração numérica qualquer. Nesse processo, a função incógnita é substituída por um vetor incógnita com as suas componentes correspondendo ao valor da função nos pontos de interpolação do integrando. A operação integração é substituída pelo produto de uma matriz cujas componentes dependem dos valores do núcleo da equação integral sobre os pontos de interpolação em x e em t , e do parâmetro numérico λ . O resultado é um sistema de equações escrito na forma de iteração e a solução é obtida resolvendo-se esse sistema, seja por uma técnica numérica clássica, aproximações sucessivas por exemplo, seja pelo método de Monte Carlo.

Por exemplo, considere a equação integral:

$$\varphi(x) = \frac{x}{2} + \frac{\pi^2}{4} \int_0^1 K(x, t)\varphi(t)dt \quad (6.4.12)$$

onde o núcleo da equação integral:

$$K(x, t) = \begin{cases} \frac{x(2-t)}{2}, & \text{se } 0 \leq x \leq t \\ \frac{t(2-x)}{2}, & \text{se } t \leq x \leq 1 \end{cases}$$

Utilizando a fórmula generalizada do trapézio, a equação integral pode ser substituída, considerando para efeito de ilustração, um conjunto de seis pontos de in-

terpolação, pelo sistema:

$$\begin{aligned}
\varphi(0) &= \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{10} K(0,0)\varphi(0) + \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{5} K(0,1)\varphi(1) + \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{5} K(0,2)\varphi(2) + \\
&\quad \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{5} K(0,3)\varphi(3) + \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{5} K(0,4)\varphi(4) + \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{10} K(0,5)\varphi(5) + \frac{x_0}{2} \\
\varphi(1) &= \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{10} K(1,0)\varphi(0) + \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{5} K(1,1)\varphi(1) + \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{5} K(1,2)\varphi(2) + \\
&\quad \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{5} K(1,3)\varphi(3) + \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{5} K(1,4)\varphi(4) + \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{10} K(1,5)\varphi(5) + \frac{x_1}{2} \\
\varphi(2) &= \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{10} K(2,0)\varphi(0) + \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{5} K(2,1)\varphi(1) + \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{5} K(2,2)\varphi(2) + \\
&\quad \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{5} K(2,3)\varphi(3) + \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{5} K(2,4)\varphi(4) + \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{10} K(2,5)\varphi(5) + \frac{x_2}{2} \\
\varphi(3) &= \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{10} K(3,0)\varphi(0) + \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{5} K(3,1)\varphi(1) + \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{5} K(3,2)\varphi(2) + \\
&\quad \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{5} K(3,3)\varphi(3) + \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{5} K(3,4)\varphi(4) + \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{10} K(3,5)\varphi(5) + \frac{x_3}{2} \\
\varphi(4) &= \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{10} K(4,0)\varphi(0) + \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{5} K(4,1)\varphi(1) + \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{5} K(4,2)\varphi(2) + \\
&\quad \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{5} K(4,3)\varphi(3) + \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{5} K(4,4)\varphi(4) + \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{10} K(4,5)\varphi(5) + \frac{x_4}{2} \\
\varphi(5) &= \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{10} K(5,0)\varphi(0) + \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{5} K(5,1)\varphi(1) + \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{5} K(5,2)\varphi(2) + \\
&\quad \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{5} K(5,3)\varphi(3) + \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{5} K(5,4)\varphi(4) + \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{10} K(5,5)\varphi(5) + \frac{x_5}{2}
\end{aligned}$$

onde os pontos x_i e t_i , com $i = 0, 1, 2, 3, 4, 5$, são os pontos de interpolação regularmente espaçados em $(0, 1)$, ou:

$$\vec{\varphi} = \vec{x} + \mathbf{ALFA} \times \vec{\varphi}$$

onde:

$$\vec{\varphi} = [\varphi(0) \ \varphi(1) \ \varphi(2) \ \varphi(3) \ \varphi(4) \ \varphi(5)]^T$$

o índice T indicando a operação de transposição, e:

$$\vec{x} = \left[\frac{x(0)}{2} \ \frac{x(1)}{2} \ \frac{x(2)}{2} \ \frac{x(3)}{2} \ \frac{x(4)}{2} \ \frac{x(5)}{2} \right]^T$$

e:

$$\text{ALFA} = \frac{\pi^2}{4} \begin{bmatrix} \frac{1}{10}K(0,0) & \frac{1}{5}K(0,1) & \frac{1}{5}K(0,2) & \frac{1}{5}K(0,3) & \frac{1}{5}K(0,4) & \frac{1}{10}K(0,5) \\ \frac{1}{10}K(1,0) & \frac{1}{5}K(1,1) & \frac{1}{5}K(1,2) & \frac{1}{5}K(1,3) & \frac{1}{5}K(1,4) & \frac{1}{10}K(1,5) \\ \frac{1}{10}K(2,0) & \frac{1}{5}K(2,1) & \frac{1}{5}K(2,2) & \frac{1}{5}K(2,3) & \frac{1}{5}K(2,4) & \frac{1}{10}K(2,5) \\ \frac{1}{10}K(3,0) & \frac{1}{5}K(3,1) & \frac{1}{5}K(3,2) & \frac{1}{5}K(3,3) & \frac{1}{5}K(3,4) & \frac{1}{10}K(3,5) \\ \frac{1}{10}K(4,0) & \frac{1}{5}K(4,1) & \frac{1}{5}K(4,2) & \frac{1}{5}K(4,3) & \frac{1}{5}K(4,4) & \frac{1}{10}K(4,5) \\ \frac{1}{10}K(5,0) & \frac{1}{5}K(5,1) & \frac{1}{5}K(5,2) & \frac{1}{5}K(5,3) & \frac{1}{5}K(5,4) & \frac{1}{10}K(5,5) \end{bmatrix}$$

Na realidade, o sistema correspondente à equação 6.4.12 foi resolvido considerando 21 pontos de interpolação. Os resultados estão apresentados na tabela 6.4.2. A equação 6.4.12 tem, para dizer a verdade, solução analítica conhecida. Mostra-se por simples substituição que:

$$\varphi(x) = \sin \frac{\pi x}{2}$$

é solução de 6.4.12. A tabela 6.4.2 compara o resultado da solução por Monte Carlo com a solução analítica.

A solução obtida pelo método de Monte Carlo se compara bem com a solução analítica. O maior desvio observado foi de 1,39 vezes o desvio erro padrão da média da solução obtida o que significa, se se considera que o valor analítico da solução deva corresponder à esperança matemática das estimativas por Monte Carlo, que a solução obtida é uma boa aproximação da solução da equação.

6.4.3 A solução da equação de condução de calor

A equação de condução de calor, escrita em coordenadas cartesianas para um meio heterogêneo e isotrópico tem a forma:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k(x, y, z) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k(x, y, z) \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k(x, y, z) \frac{\partial T}{\partial z} \right) + A_0(x, y, z, t) = \rho c(x, y, z) \frac{\partial T}{\partial t} \quad (6.4.13)$$

onde $k(x, y, z)$ é a condutividade térmica do meio, $\rho c(x, y, z)$ é a capacidade calorífica por unidade de volume meio e $A_0(x, y, z, t)$ é a taxa de produção de calor por unidade de volume. O termo taxa de produção está sendo utilizado de forma genérica. O meio tanto pode liberar calor para o meio, quando o valor da função A_0 é positivo, como absorver calor do meio, quando o valor dessa função é negativo.

Essa equação será resolvida em um região de três dimensões aplicando-se o método de Monte Carlo sobre um esquema de diferenças finitas. A região é recoberta por uma malha que, para simplificar a exposição do argumento, será considerada regular (figura 6.1). De uma forma geral, no entanto, a malha não precisa

<i>argumento</i>	<i>solução analítica</i>	<i>Monte Carlo</i>	<i>diferença solução analítica - Monte Carlo</i>
0,00	0,000000	0,0000 \pm 0,0000	0,0000
0,05	0,078459	0,0804 \pm 0,0027	-0,0010
0,10	0,156434	0,1582 \pm 0,0037	-0,0018
0,15	0,233445	0,2347 \pm 0,0043	-0,0013
0,20	0,309017	0,3110 \pm 0,0049	0,0020
0,25	0,382683	0,3815 \pm 0,0053	0,0011
0,30	0,453990	0,4513 \pm 0,0056	0,0027
0,35	0,522499	0,5219 \pm 0,0059	0,0006
0,40	0,587785	0,5964 \pm 0,0062	-0,0086
0,45	0,649448	0,6504 \pm 0,0063	-0,0010
0,50	0,707107	0,7101 \pm 0,0065	-0,0030
0,55	0,760406	0,7581 \pm 0,0065	0,0023
0,60	0,809017	0,8137 \pm 0,0067	-0,0047
0,65	0,852640	0,8560 \pm 0,0067	-0,0034
0,70	0,891007	0,8934 \pm 0,0068	-0,0024
0,75	0,923880	0,9312 \pm 0,0068	-0,0074
0,80	0,951057	0,9572 \pm 0,0069	-0,0061
0,85	0,972370	0,9732 \pm 0,0068	-0,0008
0,90	0,987688	0,9944 \pm 0,0069	-0,0067
0,95	0,996917	1,0002 \pm 0,0068	-0,0032
1,00	1,000000	1,0021 \pm 0,0067	-0,0021

Tabela 6.1: Solução da equação 6.4.11 pelo calculada pelo método de Monte Carlo, comparada com a sua solução analítica. O maior desvio corresponde 1,4 vezes o erro padrão da média do valor calculado por Monte Carlo.

ser regular. Em termos gerais, sobre região de integração se impõem uma malha composta por paralelepípedos com arestas Δx , Δy e Δz alinhados com os eixos x , y e z do sistema de coordenadas cartesianas adotado. A malha cobre toda a região de integração e pode se estender por um volume adicional envolvendo a região para facilitar a imposição de condições de contorno.

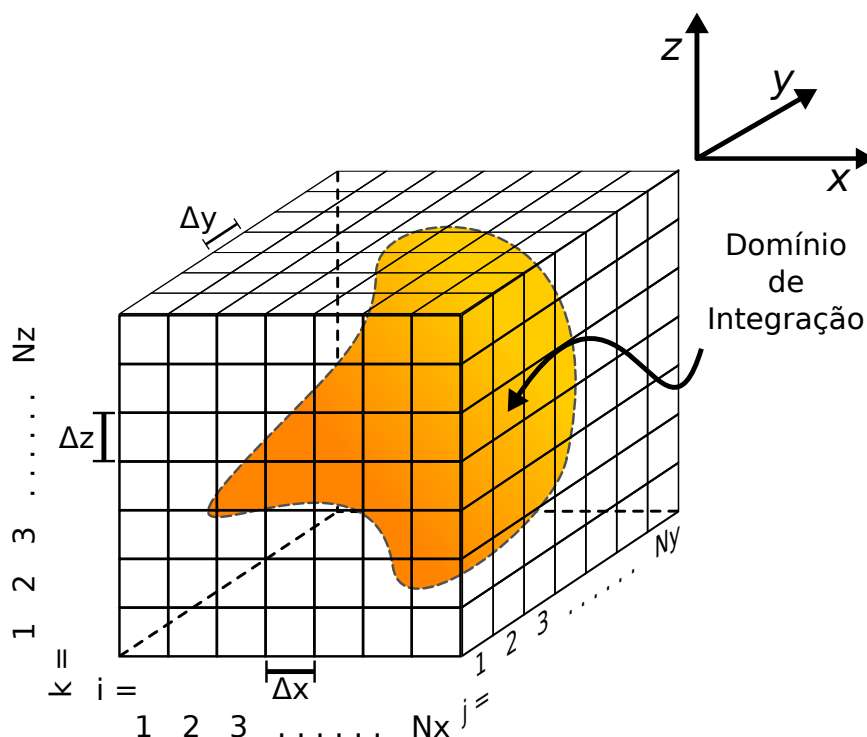


Figura 6.1: Representação esquemática da região de integração e da malha para integração por diferenças finitas.

Tomando um dos vértices do volume que envolve a região de integração como origem do sistema de coordenadas, os vértices de cada elemento passam a ser identificados por um terno de números inteiros positivos: i na direção do eixo x , j na direção do eixo y e k na direção do eixo z , com $i = 1, 2, \dots, N_x$, $j = 1, 2, \dots, N_y$ e $k = 1, 2, \dots, N_z$. Essa forma de identificar cada vértice dos elementos, ou os nós da malha, como algumas vezes são chamados, é conhecida como forma de numeração local.

O método das diferenças finitas consiste em representar de forma aproximada as derivadas espaciais que aparecem na equação 6.4.13 como diferenças entre os valores da temperatura em cada nó da malha, divididas pela distância entre os nós. A figura 6.2 ajuda a compreender como a representação das derivadas parciais em cada uma das direções x , y e z é feita em torno do ponto i, j, k . A derivada temporal também é representada por uma diferença finita no domínio do tempo. O desenvolvimento da representação em diferenças finitas da equação de condução de calor é simples, mas longo, e não será apresentado aqui. Isso significa que o leitor poderá ter necessidade

de recorrer a referências adicionais, entre as quais se recomenda [4].

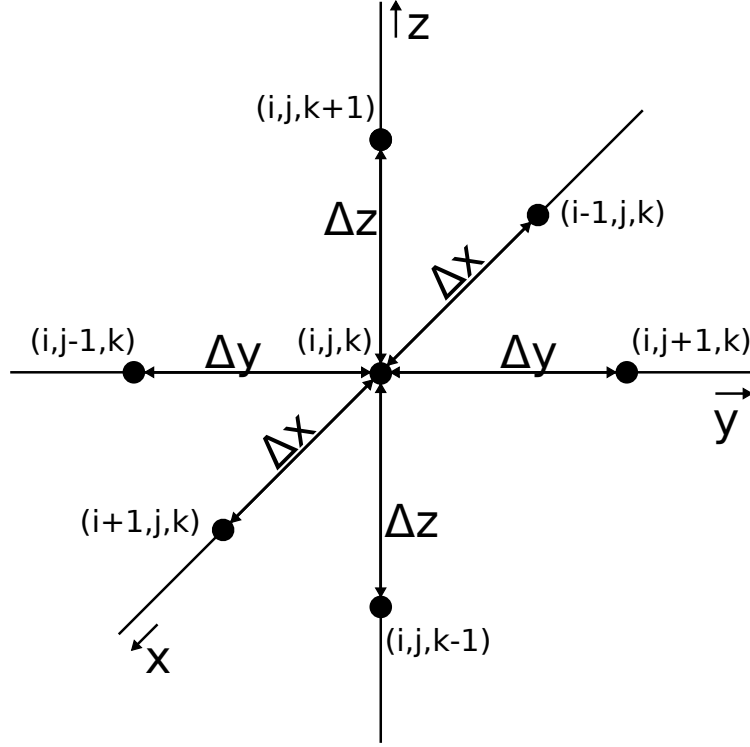


Figura 6.2: Esquema para representação por diferenças finitas das derivadas espaciais da equação de condução de calor.

A aplicação do método das diferenças finitas transforma a equação de condução de calor em:

$$\begin{aligned}
 & \frac{k_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\Delta z^2} T_{i,j,k-1}^{t+\Delta t} + \frac{k_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\Delta y^2} T_{i,j-1,k}^{t+\Delta t} + \frac{k_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\Delta x^2} T_{i-1,j,k}^{t+\Delta t} \\
 & - \left(\frac{k_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\Delta z^2} + \frac{k_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\Delta y^2} + \frac{k_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\Delta x^2} + \frac{k_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\Delta z^2} \right. \\
 & \left. + \frac{k_{i,j+\frac{1}{2},k}}{\Delta y^2} + \frac{k_{i+\frac{1}{2},j,k}}{\Delta x^2} + \frac{\rho c_{i,j,k}}{\Delta t} \right) T_{i,j,k}^{t+\Delta t} + \\
 & \frac{k_{i+\frac{1}{2},j,k}}{\Delta x^2} T_{i+1,j,k}^{t+\Delta t} + \frac{k_{i,j+\frac{1}{2},k}}{\Delta y^2} T_{i,j+1,k}^{t+\Delta t} + \frac{k_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\Delta z^2} T_{i,j,k+1}^{t+\Delta t} = \\
 & -A_{0_{i,j,k}}^t - \frac{\rho c_{i,j,k}}{\Delta t} T_{i,j,k}^t
 \end{aligned} \tag{6.4.14}$$

As condutividades térmicas nessa equação correspondem ao valor interpolado sobre o ponto central entre dois nós consecutivos.

Nessa equação, foi escolhida a forma implícita da formulação por diferenças finitas. A equação na formulação implícita das diferenças finitas consiste em um

<i>numeração local</i>	<i>numeração global</i>
$i, j, k - 1$	$l - N_x N_y$
$i, j - 1, k$	$l - N_x$
$i - 1, j, k$	$l - 1$
i, j, k	l
$i + 1, j, k$	$l + 1$
$i, j + 1, k$	$l + N_x$
$i, j, k + 1$	$l + N_x N_y$

Tabela 6.2: Relação entre a numeração local, caracterizada por um terno de índices i, j, k e a numeração global, caracterizada por um índice único $l = i + (j - 1)N_x + (k - 1)N_x N_y$.

sistema de equações onde as incógnitas são os valores de temperatura no instante $t + \Delta t$ e o termo independente consiste em uma combinação linear da taxa de produção de calor e das temperaturas no instante t . A matriz do sistema é composta por termos que dependem apenas das dimensões da malha e das propriedades térmicas do meio. A forma implícita é sempre estável e dispensa a imposição de condições de estabilidade da solução (ver, por exemplo, [4]; [25]).

Quando a equação de condução de calor é escrita em um esquema de diferenças finitas, na forma implícita, convém introduzir uma nova forma de numeração dos nós da malha, conhecida como numeração global. Na numeração global, o terno i, j, k é substituído por um único índice l definido como:

$$l = i + (j - 1) \times N_x + (k - 1) \times N_x \times N_y$$

onde l varia entre 1 e $N = N_x \times N_y \times N_z$. A tabela 6.2 mostra a relação entre as duas formas de numeração.

Com a numeração global, a equação 6.4.14 se reduz à forma $\mathbf{A}\vec{T} = \vec{B}$ onde:

$$\vec{T} = \begin{bmatrix} T_1^{t+\Delta t} \\ T_2^{t+\Delta t} \\ T_3^{t+\Delta t} \\ \vdots \\ T_{N-1}^{t+\Delta t} \\ T_N^{t+\Delta t} \end{bmatrix}$$

e:

$$\vec{B} = \begin{bmatrix} -A_{0_1}^t - \frac{\rho c_1}{\Delta t} T_1^t \\ -A_{0_2}^t - \frac{\rho c_2}{\Delta t} T_2^t \\ -A_{0_3}^t - \frac{\rho c_3}{\Delta t} T_3^t \\ \vdots \\ -A_{0_{N-1}}^t - \frac{\rho c_{N-1}}{\Delta t} T_{N-1}^t \\ -A_{0_N}^t - \frac{\rho c_N}{\Delta t} T_N^t \end{bmatrix}$$

A matriz:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & a_{1,3} & \cdots & a_{1,N} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,3} & \cdots & a_{2,N} \\ a_{3,1} & a_{3,2} & a_{3,3} & \cdots & a_{3,N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{N,1} & a_{N,2} & a_{N,3} & \cdots & a_{N,N} \end{bmatrix}$$

é esparsa e os únicos elementos não nulos de uma linha l qualquer, com índice correspondente às colunas da matriz no intervalo entre 1 e N , são $a_{l,l-N_x N_y}$, $a_{l,l-N_x}$, $a_{l,l-1}$, $a_{l,l+1}$, $a_{l,l+N_x}$ e $a_{l,l+N_x N_y}$. A tabela 6.4.3 Apresenta a forma desses termos.

O sistema correspondente à equação de condução de calor em estado transiente pode ser resolvido através do método de Monte Carlo. Para tanto, o sistema tem que ser reduzido à forma própria para a aplicação do processo iterativo:

$$\vec{x} = \vec{\beta} + \mathbf{ALFA} \vec{x} \quad (6.4.15)$$

tal como descrito no apêndice 2 deste capítulo.

As condições de iniciais são impostas definindo o vetor inicial $\{T_l^0\}$, com $l = 1, 2, \dots, N$ contendo as temperaturas iniciais. As condições de contorno são impostas sobre a matriz **ALFA**. A forma de se impor a condição de contorno depende do tipo de condição. No que segue, serão consideradas apenas condições de contorno de Dirichlet, o que corresponde a fixar a temperatura no contorno da região de integração.

A forma mais simples de impor as condições de Dirichlet é substituir as linhas da matriz **ALFA** correspondentes aos pontos de contorno por linhas onde todos os elementos são nulos e substituir a componente correspondente do vetor $\vec{\beta}$ pela temperatura do contorno. É importante lembrar, que a aplicação do método iterativo de solução exige que a matriz **A** tenha inversa, o que equivale dizer que o determinante de **A** tem que ser diferente de zero.

No caso de um sistema que corresponde a uma equação diferencial parcial, o determinante de **A** só é diferente de zero depois de aplicadas as condições de contorno. No procedimento descrito acima, a imposição da condição de contorno na forma indicada para o processo iterativo é equivalente à imposição da condição de contorno sobre a matriz original do sistema.

<i>numeração local</i>	<i>componentes da matriz \mathbf{A}</i>	<i>numeração global</i>
$i, j, k - 1$	$\frac{k_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\Delta z^2}$	$l - N_x N_y$
$i, j - 1, k$	$\frac{k_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\Delta y^2}$	$l - N_x$
$i - 1, j, k$	$\frac{k_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\Delta x^2}$	$l - 1$
i, j, k	$\left(-\frac{k_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\Delta z^2} - \frac{k_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\Delta y^2} - \frac{k_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\Delta x^2} - \right.$ $\left. \frac{k_{i+\frac{1}{2},j,k}}{\Delta x^2} - \frac{k_{i,j+\frac{1}{2},k}}{\Delta y^2} - \frac{k_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\Delta z^2} - \frac{\rho c_{i,j,k}}{\Delta t} \right)$	l
$i + 1, j, k$	$\frac{k_{i+\frac{1}{2},j,k}}{\Delta x^2}$	$l + 1$
$i, j + 1, k$	$\frac{k_{i,j+\frac{1}{2},k}}{\Delta y^2}$	$l + N_x$
$i, j, k + 1$	$\frac{k_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\Delta z^2}$	$l + N_x N_y$

Tabela 6.3: Forma das componentes da matriz \mathbf{A} . As componentes são identificadas na numeração global com a tradução para a numeração local.

A matriz **ALFA** do sistema 6.4.15, com as condições de contorno aplicadas, satisfaz a condição suficiente para a convergência do processo iterativo. Os termos diagonais da matriz \mathbf{A} são maiores em módulo do que a soma dos módulos dos demais termos das linhas correspondentes e, quando isso acontece, a **norma - m** da matriz **ALFA** é menor do que 1.

Com as condições iniciais e de contorno aplicadas, o método de Monte Carlo baseado no modelo da cadeia de Markov, pode ser aplicado para se obter o vetor $T^{\vec{\Delta}t}$. O processo repetido para cada novo passo da iteração no tempo, gera a solução aproximada da equação de condução de calor.

O método, no entanto, apresenta uma aparente dificuldade quando se considera o problema de condução de calor em estado estacionário. Nos problemas de condução em estado estacionário, a matriz **ALFA** tem a **norma - m** igual a um, uma vez que, em qualquer linha da matriz, o módulo do termo diagonal da matriz \mathbf{A} é igual à soma dos módulos dos termos não diagonais. Por outro lado, pode ocorrer que as outras duas normas canônicas usualmente calculadas, **norma - l** e **norma - k**, sejam maiores ou iguais a 1. Esse é o caso que ocorre quando a condutividade térmica é constante no meio.

Na realidade, a dificuldade é aparente e pode-se mostrar (ver, por exemplo, [14] e nas referências nele citadas) que no caso de problemas envolvendo as equações de Poisson ou de Laplace, submetidas a condições de contorno de Dirichlet, o processo de solução baseado no modelo da cadeia de Markov converge para a solução do problema. O seguinte argumento ajuda a entender porque. Note, no entanto, que o argumento a ser apresentado não é, de forma alguma, uma demonstração formal e rigorosa do resultado.

A solução em estado estacionário da equação de condução de calor pode ser considerada como sendo a solução da equação em estado transiente submetido às mesmas condições de contorno e a condições iniciais arbitrárias, no limite em que o tempo se torna indefinidamente grande. Nesse limite, a solução em estado transiente tende assintoticamente para a solução em estado estacionário. A matriz do sistema em estado transiente tende assintoticamente à matriz do sistema estacionário e a **norma - m** da matriz se aproxima indefinidamente de 1, vindo de valores inferiores a um. Da mesma forma, a soma dos n primeiros termos de cada linha da matriz de transição, que é sempre menor do que 1, se aproxima assintoticamente de 1 pela esquerda. Nessa interpretação, a cadeia de Markov tem uma probabilidade de transição para a barreira absorvente, termo $n + 1$ de cada linha, que se torna progressivamente menor, sem se anular. Isso significa que todo o esquema desenvolvido no seção 6.2 permanece válido.

Um exemplo simples de aplicação

A equação de condução de calor em estado estacionário:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = -\frac{A_0}{k}$$

foi resolvida para o caso de um sólido com a forma de um cubo com aresta de 1 metro de um material homogêneo e isotrópico caracterizado por uma condutividade térmica de $3,2W/(m \cdot K)$ e uma taxa de produção de calor de $6,5W/m^3$. As condições de contorno são do tipo de Dirichlet onde a temperatura na superfície do sólido foi fixada em zero. A região de integração foi dividida em uma malha composta por paralelepípedos iguais, cada um com 0,1 m de aresta, o que gerou um total de 1000 pontos de malha, 488 na superfície e 512 no interior do sólido.

O número de iterações adotado para a estimativa da temperatura em cada ponto da malha foi 10.000. A solução apresenta a temperatura no sólido variando de zero na superfície até $1,1208 \pm 0,0069 \text{ } ^\circ C$ no centro. As incertezas das temperaturas, que correspondem a um erro padrão da média das 10.000 iterações, variaram entre $0,0028 \text{ } ^\circ C$ e $0,0074 \text{ } ^\circ C$.

A solução fornecida pelo método de Monte Carlo foi comparada com a solução em série de Fourier do problema:

$$T(x, y, z) = \frac{8A_0}{a b c k} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1 - (-1)^l)(1 - (-1)^m)(1 - (-1)^n)}{\frac{\pi l}{a} \frac{\pi m}{b} \frac{\pi n}{c} \left(\left(\frac{\pi l}{a} \right)^2 + \left(\frac{\pi m}{b} \right)^2 + \left(\frac{\pi n}{c} \right)^2 \right)} \sin \left(\frac{l\pi}{a} x \right) \sin \left(\frac{m\pi}{b} y \right) \sin \left(\frac{n\pi}{c} z \right)$$

Cem termos foram retidos nas somatórias em l , m e n , o que gera um resto na soma da série tríplice de Fourier que não é muito inferior a 10^{-3} .

A solução obtida por Monte Carlo foi comparada com a solução em série de Fourier. O valor médio do valor absoluto da diferença entre os dois resultados foi de $0,0073^\circ C$, valor da ordem do erro padrão das temperaturas calculadas por Monte Carlo. Comparando individualmente os valores na forma:

$$\chi^2 = \left(\frac{T_l^{Monte Carlo} - T_l^{Fourier}}{erro\ padrão_l} \right)^2$$

o maior desvio observado foi de 5,2 e o menor de 0,08.

A figura 6.3 compara graficamente as temperaturas obtidas pelos dois métodos. No eixo da ordenadas estão representadas as temperaturas calculadas pelo método de Monte Carlo e no eixo das abscissas estão representadas as temperaturas calculadas pela série de Fourier.

Em termos gerais a concordância entre os dois resultados é boa. É importante ter em conta, no entanto que existem valores obtidos por Monte Carlo que se afastam muito dos valores obtidos pela série de Fourier, quando se utiliza o erro padrão da média das estimativas obtidas por Monte Carlo como escala de comparação.

Note que a cada ponto da solução obtida por série de Fourier, existem vários pontos da solução por Monte Carlo. O motivo para isso é a simetria do problema e o fato de que a série de Fourier preserva essa simetria no seu resultado, independentemente do resto devido ao truncamento da série. O comportamento do método de Monte Carlo é diferente. Em cada ponto a solução é uma estimativa independente do valor real, e essa estimativa pode variar, dentro da precisão e exatidão do método, entre dois pontos que, devido à simetria do problema, deveriam apresentar exatamente o mesmo valor. O espalhamento dos pontos em torno da reta de correlação traçada utilizando as duas soluções fornece uma indicação, ainda que grosseira, da precisão do método de Monte Carlo. O valor da inclinação da reta fornece uma estimativa, igualmente grosseira, da exatidão do resultado obtido pelo método de Monte Carlo.

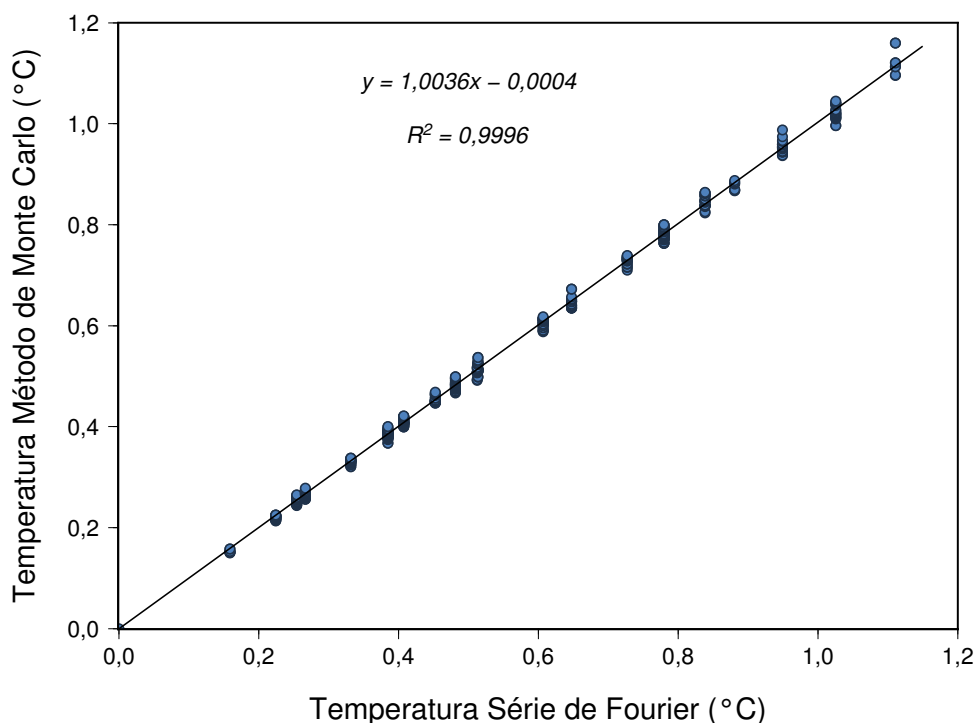


Figura 6.3: Comparação da solução de equação de condução de calor em estado estacionário pelo método de Monte Carlo (ordenadas) e por expansão em série de Fourier.

A solução dada à equação de condução de calor, que algumas vezes é chamada de método de Monte Carlo com passo fixo, sofre de limitações semelhantes às limitações das soluções dessa equação por diferenças finitas e por outras técnicas de solução

do sistema de equações lineares associado. A principal é a falta de flexibilidade para se considerar contornos irregulares. Além disso, com frequência o método de Monte Carlo não é o mais econômico para o tratamento desse problema. Existem outros métodos, conhecidos como métodos de Monte Carlo com passo variável (ver, por exemplo, [22]), que são bem mais eficientes para a solução de problemas de transferência de calor.

6.5 Exercícios

1. O sistema:

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 & -4 & 1 \\ 1 & -2 & -5 & 1 \\ 5 & -3 & 1 & -4 \\ 10 & 2 & -1 & 2 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 \\ -2 \\ -1 \\ 4 \end{bmatrix}$$

na forma em que foi apresentado pode ser resolvido pelo método de Monte Carlo sem nenhuma preparação? Porque? Como o sistema pode ser posto em uma forma adequada para ser resolvido por Monte Carlo?

2. Escreva a sua rotina para a solução de um sistema de equações lineares pelo Método de Monte Carlo, utilizando o algoritmo descrito na seção 6.3. Teste a sua rotina com o sistema 6.4.9.
3. Resolva, usando a rotina que você escreveu, a seguinte equação integral:

$$y(x) = 1 + \frac{1}{8} \int_0^1 (1 - 3xt)y(t)dt$$

Compare com a solução analítica da equação:

$$y(x) = \frac{4 + \frac{1}{4}(2 - 3x)}{3,984375}$$

6.6 Apêndice 1. Valor absoluto e norma de uma matriz

Dadas duas matrizes $\mathbf{A} = [a_{i,j}]$ e $\mathbf{B} = [b_{i,j}]$ de mesma ordem, a desigualdade $\mathbf{A} \leq \mathbf{B}$ significa que $a_{i,j} \leq b_{i,j}$.

Para uma matriz $\mathbf{A} = [a_{i,j}]$, define-se o módulo de \mathbf{A} como sendo $|\mathbf{A}| = [|a_{i,j}|]$. Se \mathbf{A} e \mathbf{B} são duas matrizes para as quais as operações de soma $\mathbf{A} + \mathbf{B}$ e de multiplicação \mathbf{AB} podem ser realizadas, então:

$$|\mathbf{A} + \mathbf{B}| \leq |\mathbf{A}| + |\mathbf{B}|$$

$$|\mathbf{AB}| \leq |\mathbf{A}| |\mathbf{B}| \Rightarrow |\mathbf{A}^p| \leq |\mathbf{A}|^p, \text{ } p \text{ sendo um número natural}$$

$$|\alpha \mathbf{A}| = |\alpha| |\mathbf{A}|, \text{ } \alpha \text{ sendo um número}$$

Define-se norma de uma matriz \mathbf{A} como sendo um número real $\|\mathbf{A}\|$ que satisfaz as seguintes condições:

O sistema 6.7.16 pode ser re-escrito na forma:

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{b_1}{a_{1,2}} - \frac{a_{1,2}}{a_{1,1}} x_2 - \frac{a_{1,3}}{a_{1,1}} x_3 - \cdots - \frac{a_{1,n}}{a_{1,1}} x_n \\ x_2 &= \frac{b_2}{a_{2,2}} - \frac{a_{2,1}}{a_{2,2}} x_1 - \frac{a_{2,3}}{a_{2,2}} x_3 - \cdots - \frac{a_{2,n}}{a_{2,2}} x_n \\ x_3 &= \frac{b_3}{a_{3,3}} - \frac{a_{3,1}}{a_{3,3}} x_1 - \frac{a_{3,2}}{a_{3,3}} x_2 - \cdots - \frac{a_{3,n}}{a_{3,3}} x_n \\ &\dots\dots\dots \\ x_n &= \frac{b_n}{a_{n,n}} - \frac{a_{n,1}}{a_{n,n}} x_1 - \frac{a_{n,2}}{a_{n,n}} x_2 - \cdots - \frac{a_{n,n-1}}{a_{n,n}} x_{n-1} \end{aligned}$$

ou:

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \\ \vdots \\ \beta_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \alpha_{1,1} & \alpha_{1,2} & \alpha_{1,3} & \cdots & \alpha_{1,n} \\ \alpha_{2,1} & \alpha_{2,2} & \alpha_{2,3} & \cdots & \alpha_{2,n} \\ \alpha_{3,1} & \alpha_{3,2} & \alpha_{3,3} & \cdots & \alpha_{3,n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \alpha_{n,1} & \alpha_{n,2} & \alpha_{n,3} & \cdots & \alpha_{n,n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \quad (6.7.17)$$

onde $\alpha_{i,j} = -a_{i,j}/a_{i,i}$ e $\beta_i = b_i/a_{i,i}$. No sistema 6.7.17 $\alpha_{i,i}$ são iguais a zero, uma vez que é essa a forma à qual o sistema se reduz quando se escreve a incógnita x_i em relação às outras incógnitas x_j , com $j \neq i$. No entanto, não é necessário que esse parâmetro seja nulo e algumas vezes é conveniente escrever $a_{i,i} = a_{i,i}^{(0)} + a_{i,i}^{(1)}$ de forma que, por exemplo, $\alpha_{i,i} = -a_{i,i}^{(1)}/a_{i,i}^{(0)}$ não seja nulo. Na realidade, para o desenvolvimento que será feito a seguir, não importa se alguns ou todos os $\alpha_{i,i}$ sejam diferentes de zero.

O método das aproximações sucessivas consiste em adotar arbitrariamente uma solução inicial, por exemplo:

$$\vec{x}^0 = \begin{bmatrix} x_1^0 \\ x_2^0 \\ x_3^0 \\ \dots \\ x_n^0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \\ \dots \\ \beta_n \end{bmatrix} \quad (6.7.18)$$

substituir essa solução no segundo membro da equação 6.7.18 e obter uma primeira aproximação:

$$\vec{x^1} = \begin{bmatrix} x_1^1 \\ x_2^1 \\ x_3^1 \\ \vdots \\ x_n^1 \end{bmatrix}$$

Introduzindo \vec{x}^1 no segundo membro da equação (6.17) se obtém uma segunda aproximação \vec{x}^2 . Se o processo convergir, ou seja, se o processo gerar uma sucessão de aproximações $\{\vec{x}^0, \vec{x}^1, \vec{x}^2, \vec{x}^3, \dots, \vec{x}^k\}$ que tenha um limite definido \vec{x} :

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \vec{x}^k = \vec{x}$$

a equação:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x^{k+1} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\vec{\beta} + [\alpha_{i,j}] x^k \right)$$

converge para:

$$\vec{x} = \vec{\beta} + [\alpha_{i,j}] \vec{x}$$

onde \vec{x} é uma solução dos sistemas 6.7.16 e 6.7.17. Como o sistema tem solução única, \vec{x} é a única solução do sistema. O problema é garantir que o limite da sucessão $\{\vec{x}^0, \vec{x}^1, \vec{x}^2, \vec{x}^3, \dots, \vec{x}^k\}$ exista. Se o limite existir as componentes do vetor solução podem ser escritas, usando como solução inicial o vetor definido na equação 6.7.18:

$$\vec{x} = (I + \mathbf{ALFA} + \mathbf{ALFA}^2 + \mathbf{ALFA}^3 + \mathbf{ALFA}^4 + \dots) \vec{\beta}$$

cujas componentes têm a forma:

$$x_i = b_i + \sum_{k=1}^{\infty} \left(\sum_{j_1=1}^n \left(\sum_{j_2=1}^n \left(\sum_{j_3=1}^n \dots \left(\sum_{j_{k-1}=1}^n \left(\sum_{j_k=1}^n \alpha_{1,j_1} \alpha_{j_1,j_2} \alpha_{j_2,j_3} \dots \alpha_{j_{k-2},j_{k-1}} \alpha_{j_{k-1},j_k} \beta_{j_k} \right) \right) \right) \right) \right) \right) \quad (6.7.19)$$

As condições necessárias e suficientes para a convergência do método das aproximações sucessivas estão estabelecidas no seguinte teorema, que será enunciado sem demonstração (para a demonstração, ver, por exemplo, [5]).

Teorema 6.2. *Para que o processo de aproximações sucessivas:*

$$x^{n+1} = \vec{\beta} + \mathbf{ALFA} x^n, \text{ com } n = 1, 2, \dots$$

onde, $\mathbf{ALFA} = [\alpha_{i,j}]$, convirja, independentemente do vetor constante $\vec{\beta}$ e para qualquer que seja a escolha do vetor inicial x^0 , é necessário e é suficiente que todas as raízes λ da equação característica:

$$\det(\mathbf{ALFA} - \lambda \mathbf{I}) = 0$$

onde I é a matriz identidade, tenham módulo inferior a um.

A verificação da convergência do método das aproximações sucessivas para um sistema particular, através da aplicação desse teorema, implica na necessidade de se poder demonstrar que os módulos de todos os autovalores da matriz do sistema a ser resolvido são menores do que um, ou no cálculo desses autovalores, o que representa um esforço adicional. No entanto, condições suficientes para a convergência do processo de aproximações sucessivas são estabelecidas pelo seguinte teorema, que também será enunciado, mas não demonstrado (ver [5]).

Teorema 6.3. *O processo de aproximações sucessivas do sistema:*

$$x^{n+1} = \vec{\beta} + \mathbf{ALFA} x^n$$

converge para uma solução única se uma norma canônica qualquer da matriz \mathbf{ALFA} for inferior a um, ou seja:

$$|\alpha_{i,j}| \leq \|\mathbf{ALFA}\| < 1$$

Em particular, se $\| \mathbf{ALFA} \|_m < 1$, ou $\| \mathbf{ALFA} \|_l < 1$, ou $\| \mathbf{ALFA} \|_k < 1$, o processo de aproximações sucessivas converge. É importante notar que, se todos $|\alpha_{i,j}| < \frac{1}{n}$, onde n é o número de incógnitas no sistema linear, o processo de aproximações sucessivas converge.

Esse teorema tem o seguinte corolário:

Corolário 6.1. *Se o sistema:*

$$\mathbf{A} \vec{x} = \vec{b}$$

com $\mathbf{A} = [a_{i,j}]$, for tal que:

$$|a_{i,i}| > \sum_{j, \text{ com } i \neq j} |a_{i,j}|$$

ou:

$$|a_{j,j}| > \sum_{i, \text{ com } i \neq j} |a_{i,j}|$$

o processo de aproximações sucessivas aplicado ao sistema converge.

Bibliografia

- [1] ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I. A. *Handbook of Mathematical Functions, with formulas graphs and tables*. [S.l.]: National Bureau of Standards, 1964. (Applied Mathematics Series 55).
- [2] ALENCAR-FILHO, E. de. *Teoria Elementar dos Conjuntos*. Nona edição. [S.l.]: Livraria Nobel S. A., 1970.
- [3] ARFKEN, G. B.; WEBER, H. J. *Mathematical Methods for Physicists*. Fourth edition. [S.l.]: Academic Press, 1995.
- [4] CARNAHAN, B.; LUTHER, H. M.; WILKES, J. O. *Applied Numerical Methods*. [S.l.]: John Wiley and Sons, 1969.
- [5] DEMIDOVITCH, B. *Éléments de Calcul Numérique*. [S.l.]: Editions Mir, 1973.
- [6] DEVLIN, K. *The Joy of Sets, Fundamentals of Contemporary Set Theory*. Second edition. [S.l.]: Springer and Verlag, 1993.
- [7] DYSON, G. *Turing's Cathedral. The origin of the digital universe*. [S.l.]: Pantheon Books, 2012.
- [8] EVES, H. *Introdução à História da Matemática*. [S.l.]: Editora Unicamp, 2004.
- [9] FELLER, W. *An Introduction to the Probability Theory and its Applications, volume 1*. [S.l.]: John Wiley and Sons, 1957.
- [10] FELLER, W. *An Introduction to the Probability Theory and its Applications, volume 2*. [S.l.]: John Wiley and Sons, 1967.
- [11] FILARDO-BASSALO, J. M.; CATTANI, M. S. D. *Elementos de Física Matemática, volume 3*. [S.l.]: Livraria da Física Editora - Casa Editorial Maluhy e Co., 2012.
- [12] HALMOS, P. R. *Naive Set Theory*. [S.l.]: Van Nostrand, 1960.
- [13] HALTON, J. H. Sequential monte carlo techniques for the solution of linear systems. v. 9, p. 213–257, 1994.
- [14] HAMMERSLEY, J. M.; HANDSCOMB, D. C. *Monte Carlo Methods*. [S.l.]: Chapman and Hall, 1964.
- [15] JACKSON, J. D. *Classical Electrodynamics*. [S.l.]: John Wiley and Sons, 1962.
- [16] KALOS, M. H.; WHITLOCK, P. A. *Monte Carlo Methods*. [S.l.]: Weinhein - Wiley - Blackwell, 2008.

- [17] KNOLL, G. F. *Radiation Detection and Measurements*. second edition. [S.l.]: John Wiley and Sons, 1989.
- [18] KRASNOV, M.; KISELEV, A.; MAKARENKO, G. *Problems and Exercises in Integral Equations*. [S.l.]: Mir Publishers, 1971.
- [19] KREMER, G. M. *Uma introdução à Equação de Boltzmann*. [S.l.]: Editora da Universidade de São Paulo, 2004.
- [20] LEHMER, D. H. Mathematical methods in large-scale computing units. In: *Proceedings of 2nd Symposium on Large-Scale Digital Calculating Machinery*. [S.l.]: Harvard University Press, 1951. p. 141–146.
- [21] MEYER, P. L. *Probabilidade. Aplicações à Estatística*. [S.l.]: Livros Técnicos e Científicos Editora S. A., 1975.
- [22] NAKAMURA, S. *Computational Methods in Engineering and Science, with Applications to Fluid Dynamics and Nuclear Sciences*. [S.l.]: John Wiley and Sons, 1977.
- [23] PAPOULIS, A. *Probability, Random Variables and Stochastic Processes*. third edition. [S.l.]: MacGraw-Hill International Editions, 1991.
- [24] POKSHEVA, J. G. *Alpha-Voltaic Study of the Radiation Damage Imparted by 4-Mev Alpha Particles to Si Solar Cells*. 1965. Lawrence Radiation Laboratory Report UCRL-16041.
- [25] PRESS, W. H. et al. *Numerical Recipes. The Art of Scientific Computing*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1977.
- [26] RHODES, R. *The Making of the Atomic Bomb*. [S.l.]: Simon and Schuster, 1986.
- [27] ROGER, M. *Méthodes de Monte-Carlo*. 2008. Service de Physique de l'État Condensé, CEA, arquivo pdf <http://iramis.cea.fr>.
- [28] RUBY, L.; RECHEN, J. B. A simpler approach to the geometrical efficiency of a parallel-disk source and detection system. *Nuclear Instruments and methods*, v. 58, p. 345–346, 1968.
- [29] SPIVAK, M. *Calculus. Calculo Infinitesimal*. [S.l.]: Editorial Reverté S. A., 1974.
- [30] SÜLI, E.; MEYRES, D. F. *An Introduction to Numerical Analysis*. [S.l.]: Cambridge university Press, 2006.
- [31] ULAM, S. M. *Adventures of a Mathematician*. [S.l.]: University of California Press, 1991.
- [32] YORIYAZ, H. O método de monte carlo para transporte de neutrons. In: ZAMBONI, C. B. (Ed.). *Fundamentos da Física dos Neutrons*. [S.l.]: Livraria da Física Editora, 2007.

Índice

- arco de Jordan, 57
- algoritmo, 1
 - de Fibonacci, definição do, 69
 - descrição do algoritmo de Bays e Durham, 67
 - determinístico, 3
 - iterativo, 2
- assimetria de uma distribuição de probabilidade, 61
- barreira absorvente, 99
- Bayes
 - teorema de, 21
- Bethe, 5
- Buffon
 - agulha de, 4, 6
- cadeia de Markov
 - funcional da trajetória, 101
 - matriz de transição de estados, 99
 - sequência de transições ou trajetória, 99
- cadeia homogênea de Markov, 96
- cadeias de Markov, 96
- campo de Borel, 14
- coeficiente de correlação de Pearson
 - definição do, 64
- conjunto
 - finito, 15
 - infinito mas enumerável, 15
 - não contável, 15
 - partição de, 21
 - universo, 8
 - vazio, 8
- conjunto de pontos
 - aberto, 56
 - aberto e conexo, 57
 - fechado, 56
 - fronteira de um, 57
- conjuntos
 - diferença entre, 8
 - diferença simétrica, 12
 - intersecção entre, 9
 - princípio de dualidade da álgebra dos, 22
 - teoria dos, 8
- convergência
 - certa, com certeza ou em todo o espaço de uma sequência de variáveis aleatórias, 51
 - em probabilidade de uma sequência de variáveis aleatórias, 53
 - no sentido dos mínimos quadrados de uma sequência de variáveis aleatórias, 53
 - quase certa, quase com certeza ou quase em todo o espaço de uma sequência de variáveis aleatórias, 52
- convergência de uma sequência numérica, 51
- curva fechada simples, 57
- de Morgan
 - leis de, 22
- desigualdade de Chebychev, 53
- desigualdade de Markov, 55
- determinante de Jacobi de uma transformação, 42
- determinante funcional de uma transformação, 42
- diferenças finitas
 - esquema implícito, 114
 - método das, 111
- domínio
 - definição de, 57
- domínio multiplamente conexo, 57
- domínio simplesmente conexo, 57
- equação de condução ou difusão de calor, 111
- equação integral
 - definição, 108

- equação integral de Fredholm, 109
- esperança matemática, 31
 - de uma função de uma variável aleatória, 33
 - condicional, 32
- estado de fronteira, 99
- evento, 8
 - certo, 10
 - complementar, 8
 - elementar, 8
 - impossível, 10
- eventos
 - classes de, 13
 - iguais, 12
 - iguais com probabilidade 1, 13
 - iguais em probabilidade, 12
 - mutuamente exclusivos, 9
 - união de, 9
- experimentos aleatórios, 7
 - independência entre, 39
 - definição de, 14
- fórmula de congruência de Lehmer, 61
- Fermi, 5
- forma quadrática de uma matriz quadrada, 47
- função
 - contradomínio de uma, 23
 - absolutamente integrável, 16
 - composição de, 23
 - conjunto imagem de uma, 23
 - contínua por partes, 17
 - definição de, 23
 - definição de função bijetora, 23
 - definição de função injetora, 23
 - definição de função inversa, 23
 - definição de função sobrejetora, 23
 - domínio de uma, 23
 - imagem de uma, 23
- função de densidade de probabilidade exponencial, 73
- função de distribuição cumulativa de Gauss, 66
- função de distribuição cumulativa de Rayleigh, 75
- função de duas variáveis aleatórias, 40
- função distribuição de probabilidade χ^2
 - definição, 62
- função erro de Gauss
 - aproximação racional, 83
 - definição da, 74, 82
- função gama
 - definição, 62
- gerador de Fibonacci
 - definição, 69
- gerador de Fibonacci com atraso ou retardo, 72
- hipótese nula
 - definição, 63
- integral de Lipschitz, 92
- jacobiano de uma transformação, 42
- Kolmogorov, 10
- Lawrence, 5
- média, 31
- média condicional, 32
- método da inversão, 75
- método da rejeição de von Neumann, 75
- método de Monte Carlo
 - definição geral de, 4
- matriz definida não positiva (ou não negativa), 47
- matriz definida positiva (ou definida negativa), 47
- matrizes hermitianas, 47
- matrizes simétricas, 47
- Metropolis, 5
- modulo m
 - aritmética da operação, 59
- momento
 - função geratriz de um, 35
- momento absoluto generalizado de ordem n , 35
- momento central absoluto de ordem n , 35
- momento central de ordem n , 35
- momento de ordem n , 35
- mudança de variáveis, 72
- número de graus de liberdade
 - definição, 61
- números
 - aleatórios, 4
 - pseudoaleatórios, 4
- norma canônica de uma matriz
 - as normas comumente usadas, 121
 - definição de, 121

- norma de uma matriz
 - definição de, 120
- Oppenheimer, 5
- probabilidade
 - axiomas básicos, 10
 - campo de, 13
 - condicional, 9
 - condicional na definição axiomática, 11
 - convolução de funções de densidade de, 40
 - definição axiomática de, 9, 10
 - definição clássica, 8, 10
 - distribuição cumulativa condicional, 20
 - espaço de, 10
 - frequência relativa, 7
 - função cumulativa conjunta, 36
 - função de densidade condicional, 20
 - função de densidade conjunta de, 38
 - função de densidade de probabilidade
 - de uma função de duas variáveis aleatórias, 40
 - função de probabilidade cumulativa
 - de uma função de duas variáveis aleatórias, 40
 - função densidade de, 19
 - função distribuição cumulativa, 19
 - função distribuição de, 19
 - relação entre as densidades de probabilidade de uma variável aleatória e de uma função dessa variável, 28
 - teorema da probabilidade total, 21
 - teoria da, 8
- probabilidade cumulativa
 - definição de, 18
- problema inverso, 30
- procedimento determinístico, 3
- processos
 - aleatórios, 3, 7
 - determinísticos, 7
- processos de Markov
 - as categorias dos, 96
 - definição de, 96
- processos estocásticos
 - auto-covariância, 49
 - autocorrelação, 49
 - classificação dos, 48
 - definição de, 48
 - definição de processos estocásticos estacionários senso estrito, 50
 - definição de processos estocásticos estacionários senso lato, 50
 - diferentes forma de interpretação dos, 48
 - função de densidade de probabilidade de primeira ordem, 49
 - função de distribuição de probabilidade de primeira ordem, 49
- processos estocásticos vetoriais, 49
- qui-quadrado $-\chi^2$ - de Pearson, 61
- regiões
 - definição de, 57
- resultado experimental, 8
- sequência de Fibonacci, 70
 - propriedades da, 71
- tentativa, 8
- teste de hipótese estatística, 62
- transformações lineares ou operadores lineares
 - definição de, 95
- transformada zeta unilateral, 36
- Ulam, 5
- valores aleatórios
 - sequência, 4
- variáveis aleatórias
 - coeficiente de correlação entre duas, 43
 - covariância entre duas, 43
 - desvio padrão, 43
 - função característica conjunta, 43
 - função de duas, 40
 - independência estatística entre, 39
 - matriz de correlação, 47
 - matriz de covariância, 47
 - momentos conjuntos, 43
 - momentos conjuntos centrais, 43
 - sequências com convergência certa, com certeza ou em todo o espaço, 51
 - sequências com convergência quase certa, quase com certeza ou quase em todo o espaço, 52

- sequências convergentes em probabilidade, 53
- sequências convergentes no sentido dos mínimos quadrados, 53
- vetor de, 44
- variáveis aleatórias não correlacionadas, 43
- variáveis aleatórias ortogonais, 43
- variável z de Fisher
 - definição da, 65
- variável aleatória, 3
 - χ^2_ν de Pearson, 61
 - variável complexa conjugada de, 47
 - definição de, 17
 - esperança condicional de uma função de uma, 32
 - esperança matemática de uma, 31
 - função característica de uma, 35
 - função de uma, 25
 - função distribuição de probabilidade de uma função de, 26
 - momento absoluto de ordem n de uma, 35
 - momento central absoluto de uma, 35
 - momento central de ordem n de uma, 35
 - momento de ordem n de uma, 35
 - momento generalizado de uma, 35
 - significado de, 18
 - variância, 34
- variância, 34
- variância de uma função de duas variáveis aleatórias, 42
- variância de uma variável aleatória contínua, 34
- variância de uma variável aleatória discreta, 35
- vetor de n variáveis aleatórias, 44
 - função de densidade de probabilidade conjunta, 44
 - função de distribuição de probabilidade conjunta, 44
- vetor de variáveis aleatórias com n dimensões
 - matriz de correlação de um, 47
 - matriz de covariância de um, 47
- vetores aleatórios linearmente independentes, 47
- vetores de processos estocásticos, 49
 - autocorrelação e auto-covariância de, 49
 - correlação cruzada e covariância cruzada de, 50
- vetores de processos estocásticos não correlacionados, 50
- vetores de processos estocásticos ortogonais, 50
- vizinhança de um ponto, 28, 56
- von Neumann, 5