MECÂNICA QUÂNTICA ESTOCÁSTICA

NERI TEREZINHA BOTH

Orientador:

Prof. Dr. VINCENT BUONOMANO

Dissertação apresentada no Instituto de Matemática, Estatística e Ciência da Computação, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Matemática Aplicada.

Julho-1981

BIBLIOTECA CENTRAL

Aos meus pais, Bruno e Helma.

Aos meus irmãos.

Ao meu amigo, Fernando.

MEUS AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Vincent Buonomano, pela sugestão e orientação do trabalho.

Ao Prof. Fernando Prado, pelo apoio e estímulo recebidos.

A Profa. Dra. Maria Cristina Bezerra, pelo acompanhamento.

Aos demais Professores, pelos ensinamentos.

A UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA - UFSC, através do Departamento de Matemática.

A todos que direta ou indiretamente colaboraram e me incentivaram.

ÍNDICE

INTRODUÇÃO.....	06
CAPÍTULO I - O FORMALISMO DA MECÂNICA QUÂNTICA EM ESPAÇOS DE HILBERT	
I.A. Introdução.....	09
I.B. Preliminares Matemáticos.....	09
I.C. Os Postulados da Mecânica Quântica.....	14
CAPÍTULO II - ALGUNS RESULTADOS DA TEORIA DE PROCESSOS ESTOCÁSTICOS	
II.A. Introdução.....	25
II.B. Conceitos Básicos da Teoria de Probabilidade e Processos Estocásticos.....	25
II.B.1. Processos Estocásticos.....	25
II.B.2. Conceitos Básicos.....	27
II.B.3. Processos de Markov.....	37
II.C. Processo de Wiener ou Processo do Movimento Browniano.	43
II.D. As Equações de Fokker-Planck.....	46
II.E. Algumas Considerações.....	57
CAPÍTULO III - MECÂNICA QUÂNTICA E PROCESSOS ESTOCÁSTICOS	
III.A. Introdução.....	59
III.B. Mais Preliminares Matemáticos.....	59
III.C. Derivação Estocástica da Equação de Schrödinger.....	65
CAPÍTULO IV - RESUMO E OBSERVAÇÕES FINAIS	
IV.A. Introdução.....	74
IV.B. Resumo do Capítulo III.....	74
IV.C. Generalizações.....	76
IV.D. Críticas.....	77
REFERÊNCIAS.....	78

RESUMO

O objetivo deste trabalho é apresentar a derivação da Equação de Schrödinger da Mecânica Quântica, que mostra a equivalência desta com um certo tipo de processo estocástico, o qual é semelhante ao Movimento Browniano.

Desenvolvemos também alguns elementos da formulação matemática da Mecânica Quântica, conceitos básicos da Teoria de Probabilidade e Processos Estocásticos.

INTRODUÇÃO

Desde o nascimento da Mecânica Quântica nas primeiras - três décadas deste século, eram grandes e bem conhecidas as controvérsias sobre a natureza da Mecânica Quântica como uma teoria científica. Estas controvérsias eram debatidas entre os mais famosos cientistas que ajudaram a desenvolver a Mecânica Quântica; como exemplo, podemos citar o famoso debate de *Sól*vay entre Einstein e Bohr. No livro de M. Jammer, conforme referência [10] uma história detalhada destas controvérsias é relatada. Vamos usar Jammer como referência geral nesta introdução.

Neste trabalho nós estamos interessados principalmente , em uma das controvérsias, que é o conceito de trajetória de uma partícula. Em Mecânica Quântica por certas razões não é permitido imaginar que a partícula sempre tem uma posição bem definida como na física clássica [12]. A Mecânica Quântica abandona o conceito clássico de trajetória bem definida. O exemplo padrão disto é o experimento da "*d*upla fenda" de Young, onde observamos que não é válido dizer que uma partícula passa por uma ou outra fenda [2] . Neste trabalho vamos apresentar uma interpretação da Mecânica Quântica chamada INTERPRETAÇÃO ESTOCÁSTICA DA MECÂNICA QUÂNTICA. Nesta interpretação imaginamos que o movimento estocástico de uma partícula é similar ao Movimento Browniano. Isto é, assumimos que a posição da partícula pode ser descrita por um processo de Markov. Fazendo certas identificações a Equação de Schrödinger, a equação básica da Mecânica Quântica, é demonstrada.

Daremos a seguir, uma breve história desta interpretação.

Em 1828, o botânico inglês R. BROWN, observou que grãos de pólen quando disseminados na água, apresentavam um movimento errático ou caótico. Tal movimento, hoje em dia conhecido sob o nome de Movimento Browniano, teria permanecido misterioso e incompreensível não fosse a formulação matemática, via a teoria cinética da matéria, dada quase 80 anos depois (1905), por A. Einstein [4], onde ele deduz, entre outras coisas, a importante equação de difusão

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} ,$$

na qual $\rho = \rho(x,t)$ representa a concentração ou densidade de probabilidade das partículas e D é a constante de difusão.

Em 1932, E. Schrödinger publicou um trabalho [Veja Jammer] onde ele compara a sua equação de onda

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

com a citada equação de difusão; o que, juntamente com observações de outros pesquisadores, deu início a interpretação da Mecânica Quântica como uma teoria clássica de probabilidade ou Processos Estocásticos, e como tal, conceitualmente de mesma estrutura que a teoria do Movimento Browniano de Einstein-Smduchowski ou o seu ulterior refinamento a teoria do Movimento Browniano de Ornstein-Uhlenbeck [3]. Dentro deste contexto, uma importante contribuição foi dada por E. Nelson em 1966 [13]. Neste trabalho ele mostrou que dado qualquer processo quântico específico, isto é, dado qualquer hamiltoniano H e função de onda inicial $\psi(x, t_0)$ existe

em correspondência um equivalente processo de Markov no espaço de coordenadas, tal que, sua densidade de probabilidade $\rho(xt)$ coincide, em qualquer instante, com aquela prevista pela Mecânica Quântica, qual seja $|\psi(xt)|^2$.

Passamos a seguir a descrever o conteúdo deste trabalho.

No Capítulo I, desenvolvemos alguns elementos do formalismo matemático da Mecânica Quântica em Espaços de Hilbert.

No Capítulo II, fizemos um resumo dos resultados básicos da teoria de Probabilidade e Processos Estocásticos, necessários para a compreensão do que vem a seguir.

No Capítulo III, fizemos a derivação estocástica da equação de Schrödinger para o observável posição, no caso não relativístico.

No Capítulo IV, apresentamos um resumo dos resultados. Fizemos alguns comentários e damos referências para situações mais gerais, isto é, para o caso relativístico e observáveis quaisquer. Também damos referências para críticas contra a Interpretação Estocástica da Mecânica Quântica.

CAPÍTULO I

O FORMALISMO DA MECÂNICA QUÂNTICA EM ESPAÇOS DE HILBERT

I.A) INTRODUÇÃO:

A formulação da Mecânica Quântica como um cálculo de operadores em espaços de Hilbert, é devida a John Von Neumann, a qual se encontra exposta em seu tratado clássico sobre os fundamentos matemáticos da Mecânica Quântica. [16]

O propósito deste capítulo é apresentar um breve esboço deste formalismo para sistemas com um número finito de graus de liberdade, não se levando em conta efeitos relativísticos.

I.B) PRELIMINARES MATEMÁTICOS:

Com o objetivo de desenvolver a notação, vamos apresentar alguns preliminares matemáticos.

Um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$, é um espaço com produto interno, positivo definido, em geral sobre o corpo dos complexos, o qual é completo com respeito a métrica gerada pelo produto interno; em outras palavras, um *espaço de Hilbert* $\mathcal{H}$, consiste dos seguintes ingredientes:

1º) $\mathcal{H}$ é um espaço vetorial.

2º) Em $\mathcal{H}$ está definido um produto interno, isto é, uma função:

$$(\cdot, \cdot) : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$$

com as seguintes propriedades:

i) $(\varphi, \psi) = \overline{(\psi, \varphi)}$

$$\text{ii)} \quad (\lambda \varphi, \psi) = \lambda (\varphi, \psi)$$

$$\text{iii)} \quad (\varphi_1 + \varphi_2, \psi) = (\varphi_1, \psi) + (\varphi_2, \psi)$$

iv) (φ, φ) é um número real não negativo, o qual é zero somente quando $\varphi = 0$.

Nas propriedades acima, $\psi, \varphi_1, \varphi_2, \varphi$ pertencem a $\mathfrak{H}$, $\lambda \in \mathbb{C}$ e $\overline{(\psi, \varphi)}$ está significando o complexo conjugado de (ψ, φ) .

39) Em $\mathfrak{H}$, a função $d : \mathfrak{H} \times \mathfrak{H} \rightarrow \mathbb{R}$, definida por:

$$d(\varphi, \psi) = [(\varphi - \psi, \varphi - \psi)]^{1/2}$$

é uma métrica relativa a qual $\mathfrak{H}$ é completo; ou seja, qualquer sequência de Cauchy (φ_n) de elementos de $\mathfrak{H}$, converge para um elemento φ de $\mathfrak{H}$; em outras palavras, se $\|\varphi_m - \varphi_n\| \rightarrow 0$ quando $m, n \rightarrow \infty$, então existe φ em $\mathfrak{H}$, tal que $(\varphi_m) \rightarrow \varphi$.

Uma aplicação $\psi \rightarrow \varphi = A\psi$ de $\mathfrak{H}$ em $\mathfrak{H}$ é um operador linear se

$$A(\alpha\psi_1 + \beta\psi_2) = \alpha A\psi_1 + \beta A\psi_2$$

para qualquer $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ e qualquer $\psi_1, \psi_2 \in \mathfrak{H}$.

O Adjunto A^* de um operador A é o único operador definido pela seguinte condição:

$$(\varphi, A\psi) = (A^*\varphi, \psi)$$

para qualquer $\varphi, \psi \in \mathfrak{H}$.

Quando $A^* = A$, A diz-se auto-adjunto ou Hermitiano.

Mostremos que $(A^*)^* = A$.

Com efeito, pela definição do operador adjunto de A temos as seguintes relações:

$$(1) \quad (A^*\varphi, \psi) = (\varphi, A\psi)$$

$$(2) \quad ((A^*)^*\psi, \varphi) = (\psi, A^*\varphi), \text{ para quaisquer } \psi \text{ e } \varphi.$$

Por conjugação da relação (1) obtemos:

$$(3) \quad (\psi, A^*\varphi) = (A\psi, \varphi)$$

Comparando-se (2) e (3) temos que:

$$(4) \quad ((A^*)^*\psi, \varphi) = (A\psi, \varphi)$$

Disto resulta que $(A^*)^* = A$. De fato, da relação (4) temos que:

$$(5) \quad ([(A^*)^* - A]\psi, \varphi) = 0, \text{ para quaisquer } \psi, \varphi.$$

Desde que φ é arbitrário, fazendo-se em (5) $\varphi = [(A^*)^* - A]\psi$, resulta:

$$(6) \quad \|[(A^*)^* - A]\psi\|^2 = ([(A^*)^* - A]\psi, [(A^*)^* - A]\psi) = 0$$

e daí obtemos:

$$[(A^*)^* - A]\psi = 0$$

ou ainda

$$(A^*)^*\psi = A\psi$$

e assim, já que ψ é arbitrário,

$$(A^*)^* = A.$$

□

Os $\psi \in \mathcal{H}$ tais que $A\psi = \lambda\psi$ para algum λ , são chamados de *autovetores* do operador A , associado ao *autovalor* λ .

Mostremos que se A é um operador Hermitiano, então seus autovalores são reais.

De fato, seja ψ tal que $A\psi = \alpha\psi$.

Como $(\psi, A\psi) = (A\psi, \psi)$, então

$$(\psi, \alpha\psi) = (\alpha\psi, \psi)$$

e daí

$$\bar{\alpha}(\psi, \psi) = \alpha(\psi, \psi).$$

Logo, $\bar{\alpha} = \alpha$, pois $\psi \neq 0$.

□

Dados $A \in L(\mathcal{H}, \mathcal{H})$ onde $L(\mathcal{H}, \mathcal{H}) = \{T: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}; T \text{ linear}\}$ e $\psi \in \mathcal{H}$, $\psi \neq 0$, consideremos o seguinte número: $\frac{(\psi, A\psi)}{(\psi, \psi)}$.

Temos que:

$$\overline{\left[\frac{(\psi, A\psi)}{(\psi, \psi)} \right]} = \frac{\overline{(\psi, A\psi)}}{\overline{(\psi, \psi)}} = \frac{(A\psi, \psi)}{(\psi, \psi)} = \frac{(\psi, A^*\psi)}{(\psi, \psi)}.$$

Logo, se $A^* = A$, então

$$\frac{(\psi, A\psi)}{(\psi, \psi)} \in \mathbb{R}$$

□

Denotemos tal número por $\langle A \rangle$ o qual será chamado a *média do operador hermitiano* A . (*)

Observemos que $\langle A - \langle A \rangle \rangle = 0$; pois para um dado $\psi \in \mathcal{H}$, $\psi \neq 0$, temos:

(*) De agora em diante consideraremos $\|\psi\|^2 = (\psi, \psi) = 1$; pois em caso contrário, tomaríamos $\tilde{\psi} = \frac{\psi}{\|\psi\|}$ e daí $(\tilde{\psi}, \tilde{\psi}) = \|\tilde{\psi}\|^2 = 1$. Isto posto a média de um operador A passa a ser $\langle A \rangle = (\psi, A\psi)$.

$$\begin{aligned} \langle A - \langle A \rangle \rangle &= (\psi, (A - \langle A \rangle) \psi) = (\psi, A\psi) - \\ &- (\psi, \langle A \rangle \psi) = \langle A \rangle - \langle A \rangle (\psi, \psi) = 0 . \end{aligned}$$

Por outro lado, $\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle$ nem sempre é zero.

De fato, para um dado $\psi \in \mathcal{H}$,

$$\begin{aligned} \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle &= (\psi, (A - \langle A \rangle)^2 \psi) = \\ &= ((A - \langle A \rangle)\psi, (A - \langle A \rangle)\psi) \end{aligned}$$

pois $A - \langle A \rangle$ é hermitiano.

$$= \|(A - \langle A \rangle)\psi\|^2 \geq 0$$

□

Dado $\psi \in \mathcal{H}$ e $A \in L(\mathcal{H}, \mathcal{H})$, o número $\|(A - \langle A \rangle)\psi\|^2$ é chamado a *variância* do operador A para o ψ dado, a qual é denotada por:

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= \|(A - \langle A \rangle)\psi\|^2 = ((A - \langle A \rangle)\psi, (A - \langle A \rangle)\psi) \\ &= (A\psi, A\psi) - (\langle A \rangle\psi, A\psi) - (A\psi, \langle A \rangle\psi) + \langle A \rangle^2 (\psi, \psi) \\ &= \|A\psi\|^2 - \langle A \rangle^2 . \end{aligned}$$

Mas ,

$$\|A\psi\|^2 = (A\psi, A\psi) = (\psi, A^2\psi) = \langle A^2 \rangle$$

Portanto,

$$\sigma^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 .$$

□

A raiz quadrada positiva de σ^2 é chamada o *desvio padrão* de A , ou a incerteza ΔA do operador A ; neste caso denotaremos por $\Delta A = (\sigma^2)^{1/2}$.

Finalmente definimos os termos espectro; espectro discreto não degenerado, espectro discreto degenerado e espectro contínuo.

O *espectro* de um operador é o conjunto dos seus autovalores.

Podem ocorrer os seguintes casos:

1) *Espectro discreto não-degenerado:*

O conjunto dos autovalores é discreto, se a cada autovalor corresponde um único autovetor, isto é, $A\varphi_i = \lambda_i \varphi_i$.

2) *Espectro discreto degenerado:*

Existem dois ou mais autovetores linearmente independentes de A , associados com o mesmo autovalor, isto é, $A\varphi_i = \lambda \varphi_i$ para $i = 1, \dots, g$ onde g é o grau de degenerescência.

3) *Espectro contínuo degenerado:*

Os autovalores são contínuos e o conceito degenerado é conforme o caso 2 acima.

4) *Espectro contínuo não-degenerado:*

Os autovalores são contínuos e não-degenerados.

5) O *espectro* pode ser a *combinação de* quaisquer destes casos, o que implica na observação "2" do postulado 4 em I.C.

I.C) OS POSTULADOS DA MECÂNICA QUÂNTICA:

Neste parágrafo estudaremos os postulados sobre os quais repousa a descrição quântica dos sistemas físicos. Antes porém, façamos uma pequena digressão sobre as várias formulações da mecânica

nica clássica, bem como sobre a descrição clássica dos sistemas físicos, a qual nos dará a pista para o seu análogo quântico.

Podemos em Mecânica Clássica descrever o movimento de um sistema físico, usando qualquer uma das três formulações equivalentes seguintes:

- 1) A formulação Newtoniana
- 2) A formulação Lagrangeana
- 3) A formulação Hamiltoniana.

De fundamental importância em qualquer uma das formulações citadas, é compreendermos o que vem a ser "o movimento de um dado sistema (em geral uma partícula) entre dois instantes de tempo".

Em geral para descrever um tal sistema introduz-se ou coordenadas cartesianas usuais (formulação Newtoniana) ou as assim chamadas coordenadas generalizadas $q_i(t)$, ($i = 1, \dots, n$) cujas derivadas temporais $\dot{q}_i(t)$ representam as velocidades generalizadas (formulação Lagrangeana e Hamiltoniana) .

A configuração instantânea de um sistema com n graus de liberdade, isto é, a sua descrição em um dado instante de tempo, é proporcionado especificando-se n coordenadas generalizadas, $q_1, q_2, \dots, q_n$. Isto corresponde a um particular ponto de um hiperespaço n dimensional no qual os q_i 's são os eixos coordenados. Este espaço n dimensional é que se conhece com o nome de *espaço de configuração* do sistema. Com o decorrer do tempo, o estado do sistema $(q_i(t), \dot{q}_i(t))$ varia. Desse modo, o sistema se move neste espaço descrevendo uma trajetória. Assim, o movimento do sistema refere-se ao seu movimento ao longo desta trajetória.

A formulação Lagrangeana nada mais é do que uma descrição da mecânica clássica no espaço de configuração, e tem por base as seguintes equações de movimento:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i}, \quad (i = 1, \dots, n)$$

onde L é igual a $T - V$ sendo T a energia cinética e V a energia potencial.

A formulação Hamiltoniana toma por base não mais $q_i(t)$, $\dot{q}_i(t)$, mas sim, $q_i(t)$ e $p_i(t)$ onde $p_i = \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} L(q_j, \dot{q}_j, t)$, o qual é o momento generalizado.

Nesta formulação, as equações do movimento são:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad \text{para } i = 1, \dots, n$$

as quais são conhecidas como as equações canônicas de Hamilton. Aqui H representa o Hamiltoniano do sistema, definido por:

$$H(q, p, t) = \left(\sum_{i=1}^m \dot{q}_i p_i \right) - L(q, \dot{q}, t)$$

onde $q = (q_1, \dots, q_n)$ e $p = (p_1, \dots, p_n)$ e o ponto usado em $\dot{q}_i$ e $\dot{p}_i$ representa derivada.

Nesta formulação, a evolução em tempo do sistema se dá no espaço $2n$ -dimensional, formado pelas coordenadas $q_1, q_2, \dots, q_n$ e $p_1, \dots, p_n$, o qual é conhecido como *espaço de fase*.

É importante frisar que o formalismo Hamiltoniano é a

linguagem com a qual a Mecânica Quântica é desenvolvida no contexto dos espaços de Hilbert.

Isto posto, podemos resumir a descrição clássica de um sistema físico, do seguinte modo:

- (MC)₁ - O estado do sistema em um tempo fixo t_0 é definido especificando-se n coordenadas generalizadas $q_i(t_0)$ e seus n momentos generalizados $p_i(t_0)$.
- (MC)₂ - O valor em um dado instante, das várias grandezas físicas associadas com o sistema (energia, momento angular, etc.) é completamente determinado quando o estado do sistema - nesse mesmo instante é conhecido.
- (MC)₃ - A evolução em tempo do estado do sistema está dada pelas equações canônicas de Hamilton.

Como dissemos no início desse parágrafo, iremos estudar os postulados sobre os quais a descrição quântica dos sistemas físicos está baseada.

Como veremos, estes postulados nos provirão de uma resposta às seguintes questões, as quais correspondem à descrição da anteriormente para os sistemas físicos clássicos.

- (MQ)₁ - Como podemos descrever matematicamente o estado de um sistema quântico em um dado tempo?
- (MQ)₂ - Dado esse estado, como podemos prever os resultados das medidas de várias grandezas físicas?
- (MQ)₃ - Como pode o estado do sistema em um tempo arbitrário t -

ser determinado quando o estado em um tempo t_0 é conhecido?

Começemos então estabelecendo os Postulados, os quais irão nos responder a estas indagações. Antes porém salientemos - que os conceitos primitivos da teoria são: *Sistema Físico*, *observável* e *estado do Sistema Físico*.

POSTULADO 1: A todo sistema S corresponde um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$, cujos vetores descrevem completamente os estados do sistema.

Observações:

- 1) Os elementos do espaço $\mathcal{H}$ são também denominados *vetores estados* ou *funções de onda* e para tais usamos a notação: $\varphi, \psi, \vartheta, \tau, \dots$
- 2) Desde que $\mathcal{H}$ é um espaço vetorial, segue-se que para quaisquer estados $\varphi, \psi \in \mathcal{H}$ e escalares α e $\beta \in \mathbb{C}$, $\alpha\varphi + \beta\psi \in \mathcal{H}$ e assim é um estado possível do sistema S . Isto é conhecido como *princípio da superposição* de estados.

POSTULADO 2: A todo observável A corresponde univocamente um operador auto-adjunto (hermitiano) A , agindo em $\mathcal{H}$.

Observação:

- 1) O fato de que os operadores associados aos observáveis serem Hermitianos é essencial, uma vez que, pelo que temos visto no § I.B, tanto os autovalores quanto a média de um operador hermitiano são números reais. Isto compatibiliza tais previsões com os resultados obtidos na prática.

POSTULADO 3: Os únicos resultados possíveis da medida de um observável A , são os autovalores do correspondente operador associado A .

Observações:

- 1) Por medida entendemos a interação do objeto quântico (elêtron, etc.) com o objeto clássico (aparelho de medir).
- 2) Já que as medidas na prática são dadas por números reais segue-se da observação do postulado anterior que os resultados são consistentes.

POSTULADO 4: Quando o observável A é medido sobre um sistema que se encontra no estado normalizado ψ , a probabilidade $dP(\alpha)$ de obter um resultado situado entre α e $\alpha + d\alpha$ é dado por:

$$dP(\alpha) = |(v_\alpha, \psi)|^2 d\alpha$$

onde v_α é o autovetor correspondente ao autovalor α do operador A .

Observações:

- 1) Não há perda de generalidade em tomar o estado ψ de um sistema quântico normalizado, isto é, $|\psi| = 1$. Se não, já que $\psi \neq 0$, consideramos o estado $\varphi = \frac{\psi}{|\psi|}$ e $|\varphi| = 1$.
- 2) O postulado acima trata somente do caso do operador A possuir espectro contínuo não-degenerado. Todavia existem outras situações onde o espectro pode se apresentar como sendo: discreto degenerado e não degenerado, contínuo degenerado ou qualquer combinação destes casos.

Por exemplo, no caso de um espectro discreto e não degenerado temos:

POSTULADO 4': (Caso de um espectro discreto não-degenerado). Quando o observável A é medido sobre um sistema que se encontra no estado normalizado ψ , a probabilidade $P(a_n)$ de obter o resultado a_n o qual é autovalor não-degenerado do operador A é:

$$P(a_n) = |(\varphi_n, \psi)|^2$$

onde φ_n é um autovetor normalizado de A associado ao autovalor a_n .

Mostremos a seguir que é possível exprimir $\langle A \rangle$, no estado ψ , como:

$$\langle A \rangle = \sum_i \lambda_i |(\psi, \varphi_i)|^2$$

dado que $A\varphi_i = \lambda_i \varphi_i, \forall i$.

De fato, sendo $\{\varphi_i\}$ uma base do espaço de estados, temos que

$$\psi = \sum_i c_i \varphi_i$$

Agora, desde que $A\varphi_i = \lambda_i \varphi_i$ resulta:

$$A\psi = \sum_j c_j A\varphi_j = \sum_j c_j \lambda_j \varphi_j$$

Mas

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= (\psi, A\psi) = \left(\sum_i c_i \varphi_i, \sum_j c_j \lambda_j \varphi_j \right) = \\ &= \sum_{ij} c_i \bar{c}_j \lambda_j \delta_{ij} = \sum_i |c_i|^2 \lambda_i \quad (*) \end{aligned}$$

pois $(\varphi_i, \varphi_j) = \delta_{ij}$.

Ainda,

$$\begin{aligned}
 (\psi, \varphi_j) &= (\sum_i c_i \varphi_i, \varphi_j) = \sum_i c_i (\varphi_i, \varphi_j) = \\
 &= \sum_i c_i \delta_{ij} = c_j \quad (**)
 \end{aligned}$$

Por (*) e (**) temos então que

$$\langle A \rangle = \sum_i \lambda_i |(\psi, \varphi_i)|^2 \quad \square$$

POSTULADO 5: Se a medida do observável A sobre o sistema no estado ψ dá com certeza (isto é, com probabilidade 1) o resultado a_n , então o estado ψ_n do sistema imediatamente após a medida é tal que $A\psi_n = a_n \psi_n$; ou seja, é autovetor associado ao resultado a_n da medida.

Observações:

- 1) Os autovetores associados aos autovalores de um observável A são chamados os autoestados do observável.
- 2) O postulado acima é conhecido com o nome de redução do estado ou redução do pacote de onda ou Postulado da projeção.
- 3) Este postulado é o único que está cercado por muita controvérsia. É considerado desnecessário por alguns pesquisadores. [10]
- 4) $|\psi(q)|^2$ representa a densidade de probabilidade que a coordenada tenha o valor q com o sistema no estado ψ . Existem certos estados nos quais uma certa grandeza física tem com certeza um auto valor. Vejamos um exemplo.

Seja $\psi(q) = \alpha \delta(q - q_0)$, α constante, onde $\delta(q - q_0)$ é a "função" δ de Dirac definida por :

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x-a) = f(a)$$

sendo f uma função contínua em $\underline{a}$.

Neste estado a coordenada do sistema dinâmico tem com certeza o valor q_0 .

Realmente, consideremos o seguinte problema de autovalor:

$$Q \psi(q) = q \psi(q)$$

onde Q é o operador de posição.

Temos :

$$Q (\alpha \delta(q - q_0)) = q (\alpha \delta(q - q_0))$$

ou

$$\alpha (q \delta(q - q_0)) = q_0$$

em virtude da definição de δ .

POSTULADO 6: (O Postulado Dinâmico). A evolução em tempo do vetor estado ψ do sistema é determinado pela equação de Schrödinger $H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$, onde H é chamado o Hamiltoniano do sistema (sua energia total na maioria dos casos) e $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, h é a constante de Planck.

Observações:

- 1) H é um operador linear definido em $\mathcal{H}$. É chamado Hamiltoniano do sistema porque é o análogo do Hamiltoniano clássico.
- 2) Dependendo do sistema físico, H tem uma forma diferente. Por exemplo:

- a) Uma partícula em um potencial $V = V(x, y, z)$ em três dimensões.

$$H = \frac{\hbar}{2m} \nabla^2 + V(x, y, z)$$

Então a Equação dinâmica (ou Equação de Schrödinger) é :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \psi + V(x, y, z) \psi$$

onde

$$\psi = \psi(x, y, z, t) .$$

- b) Uma partícula em um campo eletromagnético (spin zero)

$$H = \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \vec{A} \right) + e \varphi \right]$$

onde e é a carga da partícula, $\vec{A}(\vec{r}, t)$ o potencial vetor e $\varphi(\vec{r}, t)$ é um potencial escalar.

Como foi dito na introdução geral o objetivo principal deste trabalho é apresentar uma derivação da equação de Schrödinger, sob o ponto de vista da teoria de processos estocásticos. Daremos referências para os casos mais complicados. [4]

- 3) Desde que a evolução em tempo da função de onda ψ , está determinada por uma equação diferencial, segue-se que se conhecemos o estado inicial do sistema ou seja $\psi(t_0)$ (para algum t_0) seremos capazes de determinar o comportamento futuro de $\psi(t)$; isto é, para $t > t_0$. Neste a evolução em tempo de ψ é causal ou determinística. Mas desde que ψ só dá informação probabilística, então isto diz que se sabemos as probabilidades em um -

certo t_0 sabemos para todo $t \geq t_0$, o que é diferente da física clássica.

CONSIDERAÇÕES GERAIS:

Os postulados da Mecânica Quântica não nos dão uma maneira de encontrar o $\mathcal{H}$ que corresponde a um dado sistema físico, nem os operadores que correspondem aos observáveis físicos, nem o operador H que dá a evolução em tempo de dado sistema físico. Estas escolhas de $\mathcal{H}$, os operadores (observáveis) e H vêm da experiência via certas regras de correspondência entre Física Clássica e Mecânica Quântica. Então os postulados nos garantem a existência de $\mathcal{H}$, os operadores (observáveis) e H .

CAPÍTULO II

ALGUNS RESULTADOS DA TEORIA DE PROCESSOS ESTOCÁSTICOS

II.A) INTRODUÇÃO:

Neste capítulo faremos um resumo daqueles resultados da teoria de processos estocásticos, os quais serão necessários para a compreensão do capítulo seguinte deste trabalho. Não vamos discutir processos estocásticos na situação mais geral. Enfatizaremos dentro do possível os aspectos físicos de tais processos.

II.B) CONCEITOS BÁSICOS DA TEORIA DE PROBABILIDADE E PROCESSOS ESTOCÁSTICOS. PROCESSOS DE MARKOV:

II.B.1) PROCESSOS ESTOCÁSTICOS:

A evolução em tempo de um sistema físico é chamado um *processo estocástico* quando o sistema muda de acordo com leis probabilísticas. O *estado* do sistema em um certo instante de tempo é caracterizado pelo valor $X(t)$.

Como uma situação tipicamente física, podemos imaginar aquela, na qual, partículas estão suspensas num líquido sob o movimento dos impactos aleatórios e sucessivos entre elas.

A representação gráfica do movimento de uma destas partículas é uma *realização* do processo estocástico. Antes de definirmos formalmente *processo estocástico*, relembremos alguns conceitos elementares e básicos de probabilidade, principalmente para desenvolver a notação que vamos usar.

Seja Ω um *espaço amostral*, onde cada elemento ω de Ω é um *evento* elementar.

Seja F uma σ -álgebra de subconjuntos de Ω , isto é, F satisfaz:

- i. Se $A_n \in F$ para $n = 1, 2, \dots$, então $\bigcup_n A_n \in F$.
- ii. Se $A \in F$ então $A^c = \Omega - A \in F$.
- iii. $\emptyset \in F$.

Um elemento A de uma σ -álgebra F é denominado de *conjunto mensurável* o qual chamaremos de *evento*.

Medida é uma função m não negativa, definida em uma σ -álgebra F , tal que:

- i. $m(\emptyset) = 0$
- ii. Se A_i é uma sequência de conjuntos disjuntos em F , então

$$m\left(\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i\right) = \sum_{i=1}^{\infty} m A_i .$$

Uma medida P_r definida em F é chamada uma *medida de probabilidade* se $P_r(\Omega) = 1$. O número $P_r(A)$, $A \in F$, é chamado a *probabilidade* do evento A .

Um conjunto Ω , junto com uma σ -álgebra F e uma medida de probabilidade P_r em F , constitui o que denominamos de um *espaço de probabilidade*, o qual denotaremos por (Ω, F, P_r) ou $\Omega(F, P_r)$ ou (Ω, P_r) .

Definamos agora, o que vem a ser um processo estocástico.

Seja D um subconjunto dos reais e Ω um espaço amostral.

Um *processo estocástico* é uma função real de duas variáveis:

$$X : D \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$$

$$(t, \omega) \rightarrow X(t, \omega)$$

Para cada t fixo ,

$$X_t : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$$

definida por

$$X_t(\omega) \equiv X(t, \omega) \equiv X, \quad \omega \in \Omega$$

é uma *variável aleatória*.

Fixando um evento elementar $\omega \in \Omega$, obtemos uma função

$$X_\omega : D \rightarrow \mathbb{R}$$

definida por

$$X_\omega(t) = X(t, \omega), \quad t \in D .$$

Estas funções são denominadas *trajetórias* ou *realizações* do processo.

No que segue, consideraremos o *espaço de estado contínuo*, isto é, mudanças de estado estão ocorrendo em todo instante de tempo ($D \subset \mathbb{R}$, um subintervalo não necessariamente limitado) e suporemos que existe para os mesmos as suas densidades de probabilidade.

II.B.2) CONCEITOS BÁSICOS:

Vamos indicar por $\rho(x_1 t_1, \dots, x_n t_n)$ a *densidade de probabilidade conjunta* para que o sistema físico ocupe as posições $x_1, x_2, \dots, x_n$ nos tempos $t_1, \dots, t_n$ respectivamente. Ou ainda $\rho(x_1 t_1, \dots, x_n t_n) dx_1, \dots, dx_n$ é a probabilidade que o sistema físico esteja nos intervalos $(x_1, x_1 + dx_1), \dots, (x_n, x_n + dx_n)$ nos tempos $t_1, t_2, \dots, t_n$ respectivamente.

A função densidade de probabilidade condicional, para que o sistema ocupe a posição x_{n+1} no tempo t_{n+1} , dado que o sistema esteve em $x_1, \dots, x_n$ nos tempos $t_1, \dots, t_n$ é definida por:

$$\rho(x_1 t_1, \dots, x_n t_n | x_{n+1} t_{n+1}) = \frac{\rho(x_1 t_1, \dots, x_{n+1} t_{n+1})}{\rho(x_1 t_1, \dots, x_n t_n)} \quad (1)$$

desde que $\rho(x_1 t_1, \dots, x_n t_n) \neq 0$.

As funções densidade de probabilidade condicional ρ , satisfazem a seguinte equação, a qual é conhecida sob o nome de equação de Chapman-Kolmogorov.

$$\rho(x_1 t_1, \dots, x_{n-1} t_{n-1} | x_n t_n) = \quad (2)$$

$$\int \rho(x_1 t_1, \dots, x_n t_n | x_{n+1} t_{n+1}) \rho(x_1 t_1, \dots, x_{n-1} t_{n-1} | x_n t_n) dx_n$$

De fato, pela equação (1) segue que

$$\begin{aligned} & \int \rho(x_1 t_1, \dots, x_n t_n | x_{n+1} t_{n+1}) \rho(x_1 t_1, \dots, x_{n-1} t_{n-1} | x_n t_n) dx_n \\ &= \int \frac{\rho(x_1 t_1, \dots, x_{n+1} t_{n+1})}{\rho(x_1 t_1, \dots, x_n t_n)} \frac{\rho(x_1 t_1, \dots, x_n t_n)}{\rho(x_1 t_1, \dots, x_{n-1} t_{n-1})} dx_n \\ &= \int \frac{\rho(x_1 t_1, \dots, x_{n+1} t_{n+1})}{\rho(x_1 t_1, \dots, x_{n-1} t_{n-1})} dx_n \\ &= \frac{\rho(x_1 t_1, \dots, x_{n-1} t_{n-1}, x_{n+1} t_{n+1})}{\rho(x_1 t_1, \dots, x_{n-1} t_{n-1})} = \rho(x_1 t_1, \dots, x_{n-1} t_{n-1} | x_{n+1} t_{n+1}) \end{aligned}$$

onde aqui usamos a regra de eliminação de variáveis, isto é, "se $\rho(x_1 t_1, \dots, x_n t_n)$ representa a densidade de probabilidade das va-

riáveis aleatórias $x_1, \dots, x_n$ e integramos $f(x_1 t_1, \dots, x_n t_n)$ com respeito a certas variáveis, obtemos a densidade das variáveis restantes".

□

Dado um número real x , consideremos o evento

$$I_x = \{\omega : X(\omega) \leq x\} .$$

Sua probabilidade $P_r(I_x) = P_X$ depende de x e é denominada a *função distribuição* da variável aleatória $X_t(\omega) = X$, a qual é definida por:

$$P_X : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^+$$

$$P_X(x) \equiv P_r\{\omega : X \leq x\}$$

para qualquer $x \in \mathbb{R}$ e $\omega \in \Omega$.

A função distribuição $P_X(x)$ possui as seguintes *propriedades*:

$$1. \quad i) \quad P_X(-\infty) = 0 \qquad \text{ii) } P_X(+\infty) = 1$$

PROVA: i)

Por definição $P_X(-\infty) = P_r\{\omega : X \leq -\infty\}$. Mas

$$\{\omega : X \leq -\infty\} = \emptyset \quad \text{e} \quad P_r\{\emptyset\} = 0 .$$

Assim ,

$$P_X(-\infty) = 0$$

□

ii)

Como $X(\omega) \leq +\infty$ para todo ω , temos

$$P_X(+\infty) = P_r\{\omega : X \leq +\infty\} = P_r(\Omega) = 1 .$$

Assim

$$P_X(+\infty) = 1$$

□

2. P_X é uma função não decrescente de x ; isto é, $P_X(x_1) \leq P(x_2)$ para $x_1 < x_2$.

PROVA: Com efeito; observemos que se $x_1 < x_2$, então o evento $\{\omega : X \leq x_1\}$ está contido no evento $\{\omega : X \leq x_2\}$. Logo

$$P_r\{\omega : X \leq x_1\} \leq P_r\{\omega : X \leq x_2\}$$

e assim $P_X(x)$ é não decrescente.

□

3. P_X é contínua a direita.

PROVA: Com efeito, seja (x_n) uma sequência não crescente com limite x_0 . Consideremos $A_n = \{\omega \mid X(\omega) \leq x_n\}$, $n=1,2,\dots$, os quais constituem uma sequência não crescente $A \subseteq A_n \subseteq \dots \subseteq A_2 \subseteq A_1$, cujo limite é $A = \{\omega \mid X(\omega) \leq x_0\}$.

Mostremos que

$$\bigcap_{n=1}^{\infty} A_n = A = \{\omega \mid X(\omega) \leq x_0\}$$

De fato, seja $\omega \in \bigcap_{n=1}^{\infty} A_n$, então $\omega \in A_n$, $\forall n, n=1,2,\dots$, assim $X(\omega) \leq x_n$, $\forall n$.

Mas como $(x_n) \rightarrow x_0$, então $X(\omega) \leq x_0$ implica que $\omega \in A$.

Logo,

$$\bigcap_{n=1}^{\infty} A_n \subset A$$

Por outro lado, seja $\omega \in A$, então $X(\omega) \leq x_0$, mas $x_0 \leq x_n$, $\forall n$, então $\omega \in A_n$, $\forall n$. Logo, $A \subset \bigcap_{n=1}^{\infty} A_n$.

Portanto, $A = \bigcap_{n=1}^{\infty} A_n$.

Logo, pela propriedade da continuidade de Probabilidade ,
conforme Rozanov, pág. 20 , $P_r(A_n) \rightarrow P_r(A)$, isto é,

$$P_X(x_n) \rightarrow P_X(x_0^+)$$

Se a função P_X é absolutamente contínua e diferenciável -
para todo x , então sua derivada $\frac{dP_X}{dx} = \rho(x)$ é a densidade de pro-
babilidade.

Muito importante na teoria de probabilidade e em suas
aplicações, são certos números constantes que são obtidos de acor-
do com regras específicas através da *função densidade* da variável
aleatória. Estas constantes servem para dar uma descrição quantita-
tiva e geral da variável aleatória. De particular importância são:
a esperança, a variância, o desvio padrão, etc., as quais passamos
a descrever.

a) Seja $X = X_t(\omega)$ uma variável aleatória *contínua* e
 $\rho(x)$ a sua densidade de probabilidade. Então a esperança ou média
de X é definida por:

$$E(X) = \int_R x \rho(x) dx \quad (3)$$

desde que $\int_R |x| \rho(x) dx$ exista.

Uma outra notação empregada para a esperança é $E(X) = \mu$.

PROPRIEDADES DA ESPERANÇA

1. Para toda constante a

$$E(aX) = a E(X) .$$

PROVA: Pela definição de esperança

$$E(aX) = \int_{\mathbb{R}} x a f(x) dx = a \int_{\mathbb{R}} x f(x) dx = aE(X) .$$

□

2. Se $X_1, X_2, \dots, X_n$ são variáveis aleatórias com esperanças, então a esperança de sua soma existe e é a soma de suas esperanças.

$$E(X_1 + \dots + X_n) = E(X_1) + \dots + E(X_n) .$$

PROVA: É suficiente provar para o caso de duas variáveis X_1 e X_2 , pois o caso $n > 2$, segue-se por indução.

Por definição

$$\begin{aligned} E(X_1 + X_2) &= \int (x_1 + x_2) f(x_1, t_1, x_2, t_2) dx_1 dx_2 \\ &= \int x_1 f(x_1, t_1, x_2, t_2) dx_1 dx_2 + \int x_2 f(x_1, t_1, x_2, t_2) dx_1 dx_2 \\ &= \int_{x_1} x_1 \left(\int_{x_2} f(x_1, t_1, x_2, t_2) dx_2 \right) dx_1 + \\ &\quad \int_{x_2} x_2 \left(\int_{x_1} f(x_1, t_1, x_2, t_2) dx_1 \right) dx_2 \\ &= \int_{x_1} x_1 f(x_1, t_1) dx_1 + \int_{x_2} x_2 f(x_2, t_2) dx_2 \\ &= E(X_1) + E(X_2) . \end{aligned}$$

□

3. Se X_1, X_2 são variáveis aleatórias *independentes*, isto é, sua densidade de probabilidade conjunta é dada por

$$p(X_1, X_2) = f(x_1) f(x_2)$$

com esperanças finitas, então seu produto é uma variável aleatória com esperança finita e $E(X_1 X_2) = E(X_1) E(X_2)$.

PROVA: Seja $f(x_1)$ a densidade da variável aleatória X_1 e $f(x_2)$ a densidade da variável aleatória X_2 , então por definição

$$\begin{aligned} E(X_1 X_2) &= \int x_1 x_2 f(x_1, x_2) dx_1 dx_2 \\ &= \int x_1 x_2 f(x_1) f(x_2) dx_1 dx_2 \\ &= \int x_1 f(x_1) dx_1 \int x_2 f(x_2) dx_2 \end{aligned}$$

(pois a esperança de X_1 e X_2 existe)

$$= E(X_1) E(X_2) .$$

□

4. A esperança de uma constante é a própria constante.

PROVA: Por definição

$$E(C) = \int c f(x) d(x) = C \int f(x) dx = C \cdot 1 = C$$

□

b) A *variância* de X é definida por $E(X - E(X))^2$.

Decorre desta definição que:

$$\begin{aligned} \text{Var } X &= E [X^2 - 2X E(X) + (EX)^2] \\ &= E(X^2) - 2E(X) E(X) + (E(X))^2 \\ &= E(X^2) - (E(X))^2 . \end{aligned}$$

Denotando $E(X)$ por μ e $\text{Var } X$ por σ^2 , temos que

$$\sigma^2 = E(X^2) - \mu^2 \quad (4)$$

PROPRIEDADES DA VARIÂNCIA

1. A variância de uma constante é zero.

$$\sigma^2(c) = 0 .$$

PROVA: Por definição

$$\sigma^2(C) = E(C-E(C))^2 = E(C-C)^2 = E(0) = 0 .$$

□

2. Se C é constante, então

$$\sigma^2(CX) = C^2 \sigma^2(X)$$

PROVA: Com efeito. Pela propriedade (i) da esperança de X , temos:

$$\begin{aligned} \sigma^2(CX) &= E(CX - E(CX))^2 = E(CX - CE(X))^2 \\ &= E C^2 (X - E(X))^2 = C^2 E(X - E(X))^2 \\ &= C^2 \sigma^2(X) . \end{aligned}$$

□

3. A variância da soma das variáveis independentes X_1 e X_2 é igual a soma das variâncias

$$\sigma^2(X_1+X_2) = \sigma^2(X_1) + \sigma^2(X_2) .$$

PROVA: De fato

$$\begin{aligned} \sigma^2(X_1+X_2) &= E\left[X_1+X_2 - E(X_1+X_2)\right]^2 \\ &= E\left[(X_1 - E(X_1)) + (X_2 - E(X_2))\right]^2 \\ &= \sigma^2(X_1) + \sigma^2(X_2) + 2E\left[(X_1 - E(X_1))(X_2 - E(X_2))\right] \end{aligned}$$

Mas as variáveis X_1 e X_2 sendo independentes, segue-se que as variáveis aleatórias $X_1 - E(X_1)$ e $X_2 - E(X_2)$ também o são e assim

$$E\left[(X_1 - E(X_1))(X_2 - E(X_2))\right] = E(X_1 - E(X_1))E(X_2 - E(X_2)) = 0 .$$

Portanto

$$\sigma^2(X_1+X_2) = \sigma^2(X_1) + \sigma^2(X_2)$$

□

$$4. \sigma^2(aX+b) = a^2 \sigma^2(X) .$$

PROVA: De fato

$$\sigma^2(aX+b) = \sigma^2(aX) + \sigma^2(b)$$

$$\text{(pela propriedade i e ii.)} = a^2 \sigma^2(X) + 0$$

$$= a^2 (\sigma^2(X)) .$$

□

c) O *desvio padrão* da variável aleatória é a raiz quadrada positiva da sua variância; ou seja

$$\sigma = (\text{Var}(X))^{1/2} = (\sigma^2(X))^{1/2} \quad (5)$$

d) Seja $r \geq 0$ um inteiro. Se a esperança da variável aleatória X^r existe; então ela é chamada o *r-ésimo momento* de X em torno da origem. Se a integral $\int x^r f(x)dx$ não converge, dizemos que o *r-ésimo momento* não existe. Agora observemos que, se $|x|^{r-1} \leq |x|^r + 1$, para todo $r > 1$, segue-se que, sempre que o *r-ésimo momento* existe, existe também o *(r-1)-ésimo momento* e assim todos os momentos precedentes; uma vez que convergência absoluta, implica em convergência usual, ou seja se $\int |f(x)|dx < \infty$ segue-se que $\int f(x)dx < \infty$ trivialmente.

e) A *covariância* de X_1 e X_2 é definida por

$$\text{Cov}(X_1, X_2) = E\left((X_1 - \mu_1)(X_2 - \mu_2)\right) = E(X_1 X_2) - \mu_1 \mu_2 \quad (6)$$

onde $\mu_1 = E(X_1)$ e $\mu_2 = E(X_2)$.

PROPRIEDADE DA COVARIÂNCIA

Se X_1, X_2 são independentes, então $\text{Cov}(X_1, X_2) = 0$.

PROVA: Se X_1 e X_2 são independentes, então

$$E(X_1 X_2) = E(X_1) E(X_2) .$$

Assim ,

$$\text{Cov}(X_1, X_2) = E(X_1 X_2) - E(X_1)E(X_2) = 0 .$$

□

f) Seja X uma variável aleatória qualquer com esperança μ e variância σ^2 . Seja sua variável normalizada X^* definida por:

$$X^* = \frac{X - \mu}{\sigma}$$

A esperança de X^* é igual a zero e a variância de X^* igual a um; isto é:

i. $E(X^*) = 0$

ii. $\sigma^2(X^*) = 1$.

PROVA: i. $E(X^*) = 0$.

De fato, como $X^* = \frac{X - \mu}{\sigma}$, então

$$\begin{aligned} E(X^*) &= E\left(\frac{X - \mu}{\sigma}\right) = \frac{1}{\sigma} E(X - \mu) \\ &= \frac{1}{\sigma} (E(X) - \mu) = \frac{1}{\sigma} (\mu - \mu) = 0 \end{aligned}$$

□

PROVA: ii. $\sigma^2(X^*) = 1$.

Com efeito; como $X^* = \frac{X - \mu}{\sigma}$, temos

$$\sigma^2(X^*) = \sigma^2\left(\frac{X - \mu}{\sigma}\right) = \sigma^2\left(\frac{1}{\sigma}(X - \mu)\right)$$

(mas μ é constante e pela propriedade da variância iv)

$$= \frac{1}{\sigma^2} (\sigma^2(X)) = 1$$

□

Daí o nome de variáveis aleatórias normalizadas.

Do que vimos acima, decorre que sempre podemos, sem perda de generalidade, considerar as variáveis aleatórias como sendo normalizadas.

g) Sejam X_1^* e X_2^* as variáveis normalizadas de X_1 e X_2 , respectivamente.

A covariância de X_1^* e X_2^* é chamada de *coeficiente de correlação* de X_1 e X_2 e denotaremos por $\delta(X_1, X_2)$. Então

$$\delta(X_1, X_2) = \text{Cov}(X_1^*, X_2^*) = \frac{\text{Cov}(X_1, X_2)}{\sigma_1 \sigma_2} \quad (7)$$

II.B.3) PROCESSOS DE MARKOV:

Um processo estocástico $X(t)$ é chamado um *processo de Markov* quando

$$p(x_1 t_1, \dots, x_n t_n | x_{n+1} t_{n+1}) = p(x_n t_n | x_{n+1} t_{n+1}) \quad (8)$$

para $t_1 < t_2 < \dots < t_n < t_{n+1}$, para todo $n > 1$.

Intuitivamente isto quer dizer que a probabilidade do sistema ir do estado x_n no tempo t_n , a qualquer outro estado, não depende da história prévia do sistema; em outras palavras, informações sobre o comportamento passado do processo, não influencia no conhecimento do comportamento futuro, quando se conhece exatamente o seu estado presente.

No contexto dos processos Markovianos a equação (2) tor

na-se

$$\rho(x_{n-1}t_{n-1} | x_{n+1}t_{n+1}) = \int \rho(x_{n-1}t_{n-1} | x_n t_n) \rho(x_n t_n | x_{n+1}t_{n+1}) dx_n \quad (9)$$

onde $t_{n-1} < t_n < t_{n+1}$, para qualquer n ; e $\rho(x_1 t_1 | x_2 t_2)$, $\rho(x_2 t_2 | x_3 t_3) \dots$ são denominadas de *função densidade de transição de probabilidade*.

Se a função densidade de probabilidade existe, então multiplicando a equação (9) por $\rho(x_{n-1}t_{n-1})$ encontramos

$$\begin{aligned} \rho(x_{n-1}t_{n-1} | x_{n+1}t_{n+1}) \rho(x_{n-1}t_{n-1}) &= \\ = \int \rho(x_{n-1}t_{n-1} | x_n t_n) \rho(x_{n-1}t_{n-1}) \rho(x_n t_n | x_{n+1}t_{n+1}) dx_n \end{aligned} \quad (10)$$

Mas sendo

$$\rho(x_{n-1}t_{n-1} | x_{n+1}t_{n+1}) = \frac{\rho(x_{n-1}t_{n-1}, x_{n+1}t_{n+1})}{\rho(x_{n-1}t_{n-1})}$$

e

$$\rho(x_{n-1}t_{n-1} | x_n t_n) = \frac{\rho(x_{n-1}t_{n-1}, x_n t_n)}{\rho(x_{n-1}t_{n-1})}$$

segue-se da equação (10) que:

$$\begin{aligned} \rho(x_{n-1}t_{n-1}, x_{n+1}t_{n+1}) &= \\ = \int \rho(x_{n-1}t_{n-1}, x_n t_n) \rho(x_n t_n | x_{n+1}t_{n+1}) dx_n \end{aligned} \quad (11)$$

integrando (11) com respeito a x_{n-1} e usando a regra de eliminação de variáveis obtemos:

$$\rho(x_{n+1}t_{n+1}) = \int \rho(x_n t_n) \rho(x_n t_n | x_{n+1}t_{n+1}) dx_n \quad (11')$$

para $t_n < t_{n+1}$.

Consideremos agora os instantes de tempo t, s, τ , tal que $t < s < \tau$ e $\frac{\partial}{\partial z} P(xt|zs)dz$ é a densidade de probabilidade de que o sistema passe do estado x no tempo t , para o intervalo $(z, z+dz)$ no tempo s . $P(zs|y\tau)$ é a distribuição de probabilidade de que o sistema estando em z no tempo s , passe para o estado y no tempo τ , então a distribuição de probabilidade condicional de que o sistema estará em y no tempo τ dado que estava em x no tempo t é dada por

$$P(xt|y\tau) = \int P(zs|y\tau) \frac{\partial}{\partial z} P(xt|zs)dz \quad (12)$$

a qual provém da equação (9) é a chamada equação *generalizada de Markov*, onde $P(xt|y\tau)$ é a *distribuição condicional* definida por

$$P(xt|y\tau) = \frac{P(xt, y\tau)}{P(xt)} \quad (12')$$

Analisaremos agora, a descrição em tempo dos processos estocásticos. Podemos adotar os dois pontos de vista seguintes:

- a) A descrição posterior ou para frente.
- b) A descrição anterior ou para trás.

Tratemos de cada caso em separado.

a) A densidade de probabilidade condicional que já discutimos, definida por $\rho(x_1 t_1, \dots, x_n t_n | x_{n+1} t_{n+1}) = \rho(x_n t_n | x_{n+1} t_{n+1})$ para processos de Markov, conforme a equação (9) deste capítulo, é chamada *função densidade de transição de probabilidade posterior*, a qual representa a densidade de probabilidade de encontrar o sistema no estado x_{n+1} no tempo t_{n+1} dado que o sistema está no estado x_n no tempo $t_n, \dots$, no estado x_1 no tempo t_1 com -

$t_1 < t_2 \dots < t_n < t_{n+1}$, para n arbitrário.

Desde que desejamos descrever processos os quais são simétricos em tempo (isto é, processos para os quais uma inversão no tempo, $t \rightarrow -t$, não altera suas propriedades, introduzimos a descrição anterior.

b) Definimos a *densidade de probabilidade condicional - anterior* $\rho_*(x_n t_n, \dots, x_2 t_2 | x_1 t_1)$ como sendo

$$\rho_*(x_n t_n, \dots, x_2 t_2 | x_1 t_1) = \frac{\rho(x_1 t_1, \dots, x_n t_n)}{\rho(x_2 t_2, \dots, x_n t_n)} \quad (13)$$

onde $t_1 < t_2 < \dots < t_n$, desde que $\rho(x_2 t_2, \dots, x_n t_n) \neq 0$, a qual representa a densidade de probabilidade do sistema no estado x_1 no tempo t_1 , dado que nos tempos anteriores $t_2, \dots, t_n$ o sistema ocupe os estados $x_2, \dots, x_n$.

Vamos mostrar que a propriedade de Markov de um processo é invariante por uma inversão do tempo; ou seja, se um dado - processo estocástico tem a propriedade

$$\rho(x_1 t_1, \dots, x_{n-1} t_{n-1} | x_n t_n) = \rho(x_{n-1} t_{n-1} | x_n t_n)$$

na *descrição posterior*, então ele tem a propriedade similar

$$\rho_*(x_n t_n, \dots, x_2 t_2 | x_1 t_1) = \rho_*(x_2 t_2 | x_1 t_1) \quad (14)$$

na *descrição anterior*.

De fato, pela equação (8) temos

$$\rho(x_1 t_1, \dots, x_{n-1} t_{n-1} | x_n t_n) = \rho(x_{n-1} t_{n-1} | x_n t_n) \quad (15)$$

e pela equação (1) sabemos que

$$\rho(x_1 t_1, \dots, x_{n-1} t_{n-1} | x_n t_n) = \frac{\rho(x_1 t_1, \dots, x_n t_n)}{\rho(x_1 t_1, \dots, x_{n-1} t_{n-1})} \quad (16)$$

então

$$\begin{aligned} \rho(x_1 t_1, \dots, x_n t_n) &= \\ &= \rho(x_1 t_1, \dots, x_{n-1} t_{n-1} | x_n t_n) \rho(x_1 t_1, \dots, x_{n-1} t_{n-1}) \end{aligned} \quad (17)$$

mas por (15) temos

$$\rho(x_1 t_1, \dots, x_{n-1} t_{n-1} | x_n t_n) = \rho(x_{n-1} t_{n-1} | x_n t_n)$$

por (16)

$$= \frac{\rho(x_{n-1} t_{n-1}, x_n t_n)}{\rho(x_{n-1} t_{n-1})}$$

Portanto a equação (17) fica

$$\rho(x_1 t_1, \dots, x_n t_n) = \rho(x_1 t_1, \dots, x_{n-1} t_{n-1}) \frac{\rho(x_{n-1} t_{n-1}, x_n t_n)}{\rho(x_{n-1} t_{n-1})} \quad (18)$$

Agora, vejamos que resolvendo de forma análoga

$$\rho(x_1 t_1, \dots, x_{n-i} t_{n-i} | x_{n-i+1} t_{n-i+1})$$

onde n fixo e para $i = 2, 3, \dots$ até que $n-i+1 = 2$, e substituindo $\rho(x_1 t_1, \dots, x_{n-i} t_{n-i}, x_{n-i+1} t_{n-i+1})$ recursivamente em (18), temos:

$$\rho(x_1 t_1, \dots, x_n t_n) = \frac{\rho(x_1 t_1, x_2 t_2), \dots, \rho(x_{n-1} t_{n-1}, x_n t_n)}{\rho(x_2 t_2) \rho(x_3 t_3) \dots \rho(x_{n-1} t_{n-1})} \quad (19)$$

Mas sabemos que

$$\rho_*(x_n t_n, \dots, x_2 t_2 | x_1 t_1) = \frac{\rho(x_1 t_1, \dots, x_n t_n)}{\rho(x_2 t_2, \dots, x_n t_n)}$$

então através da equação (19), temos

$$\begin{aligned} \rho_{*}(x_n t_n, \dots, x_2 t_2 | x_1 t_1) &= \left[\frac{\rho(x_1 t_1, x_2 t_2) \dots \rho(x_{n-1} t_{n-1}, x_n t_n)}{\rho(x_2 t_2) \rho(x_3 t_3) \dots \rho(x_{n-1} t_{n-1})} \right] / \\ &\quad \left[\frac{\rho(x_2 t_2, x_3 t_3) \dots \rho(x_{n-1} t_{n-1}, x_n t_n)}{\rho(x_3 t_3) \dots \rho(x_{n-1} t_{n-1})} \right] \\ &= \frac{\rho(x_1 t_1, x_2 t_2)}{\rho(x_2 t_2)} = \rho_{*}(x_2 t_2 | x_1 t_1) \end{aligned}$$

Portanto

$$\rho_{*}(x_n t_n, \dots, x_2 t_2 | x_1 t_1) = \rho_{*}(x_2 t_2 | x_1 t_1)$$

□

Existe uma relação entre a densidade de transição de probabilidade posterior e a densidade de transição de probabilidade anterior, dada pela equação

$$\rho_{*}(x_2 t_2 | x_1 t_1) = \rho(x_1 t_1 | x_2 t_2) \frac{\rho(x_1 t_1)}{\rho(x_2 t_2)} \quad (20)$$

Com efeito, pela definição de densidade de transição de probabilidade anterior, ou seja

$$\rho_{*}(x_2 t_2 | x_1 t_1) = \frac{\rho(x_1 t_1, x_2 t_2)}{\rho(x_2 t_2)}$$

e levando-se em conta que

$$\rho(x_1 t_1, x_2 t_2) = \rho(x_1 t_1) \rho(x_1 t_1 | x_2 t_2)$$

resulta que

$$\rho_{*}(x_2 t_2 | x_1 t_1) = \frac{\rho(x_1 t_1)}{\rho(x_2 t_2)} \rho(x_1 t_1 | x_2 t_2)$$

□

II.C) PROCESSO DE WIENER OU PROCESSO DO MOVIMENTO BROWNIANO:

O assim chamado *movimento Browniano* foi descrito pela primeira vez no ano de 1828 pelo botânico *Robert Brown*. Investigando o pólen de diferentes plantas, ele observou que o mesmo quando disseminado em água apresentava um movimento ininterrupto e irregular.

A tal movimento caótico das partículas foi dada uma formulação matemática por *Einstein* no começo deste século (1905), usando a Teoria Cinética da matéria.

Na atualidade tal processo do movimento Browniano possui um modelo matemático que reflete todas as propriedades que possam vir a ser determinadas experimentalmente. Tal modelo matemático é conhecido sob o nome de *Processo de Wiener*, o qual passamos a considerar.

Um processo estocástico $X(t)$ é chamado um processo com *incrementos independentes* se para $t > s$ as variáveis aleatórias $X(t) - X(s)$ e $X(s)$ são independentes. Pode ser demonstrado que qualquer processo com *incrementos independentes* é um processo de *Markov*.

Dizemos que o processo estocástico $X(t)$ é um *processo de incrementos estacionários* se $Y(t) = X(t+h) - X(t)$ for estacionário; isto é, se a distribuição conjunta de $Y(t_1+h), \dots, Y(t_n+h)$ for a mesma que a distribuição de $Y(t_1), \dots, Y(t_n)$ para todo n , para toda escolha de $t_1, \dots, t_n$ e para todo h .

Um processo estocástico $W(t)$, diz-se um *processo de Wiener* ou um processo de movimento Browniano se ele tem as seguintes propriedades:

1. $W(0) = 0$ com probabilidade um.
2. $W(t)$ tem incrementos independentes estacionários.
3. $E(W(t)) = 0, \forall t$.
4. Para qualquer intervalo de tempo (s, t) , $W(t) - W(s)$ está normalmente distribuída com variância $\sigma^2(t-s)$. (Normalmente distribuída significa que $W(t) - W(s)$ possui distribuição normal.)

Costuma-se também definir um processo de Wiener com velocidade média μ definida por

$$\begin{aligned} \mu(x, t) &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0^+} E \left(\frac{X(t+\Delta t) - X(t)}{\Delta t} \right) \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0^+} \frac{1}{\Delta t} E[X(t+\Delta t) - X(t)] \\ &= \lim_{t_2 \rightarrow t_1^+} \frac{1}{(t_2 - t_1)} E_{X(t)} [X(t_2) - X(t_1)] \end{aligned}$$

onde $t_2 = t + \Delta t$, $t = t_1$.

$$= \lim_{t_2 \rightarrow t_1^+} \frac{1}{(t_2 - t_1)} \int [X(t_2) - X(t_1)] \rho(x_1, t_1 | x_2, t_2) dx_2$$

para $X(t_2) = x_2$ e $X(t_1) = x_1$ temos

$$\mu(x_1, t_1) = \lim_{t_2 \rightarrow t_1^+} \frac{1}{(t_2 - t_1)} \int [x_2 - x_1] \rho(x_1, t_1 | x_2, t_2) dx_2 \quad (21)$$

Acima, bem como no prosseguimento deste trabalho, sempre que o domínio de integração não estiver indicado estamos considerando a reta real.

e parâmetro de variância σ^2 como um processo estocástico $W(t)$ com as propriedades:

1. $W(t)$ tem incrementos independentes.
2. Para qualquer intervalo $(t, t+dt)$, $W(t+dt) - W(t) = dW(t)$, está normalmente distribuído com média e variância dadas por
 - i. $E(dW(t)) = \mu dt$
 - ii. $E[dW(t) - E(dW(t))]^2 = \sigma^2 dt$

Como os processos de Wiener possuem incrementos independentes, segue-se que eles são de *Markov*.

Os processos de Wiener e mais geralmente os processos da forma

$$dX(t) = X(t+dt) - X(t) = \mu(x,t)dt + dW(t) \quad (22)$$

estão relacionados com a equação de difusão.

Na equação (22) acima temos abreviado a seguinte expressão:

$$X(t) - X(a) = \int_a^t \mu(x,s)ds + \int_a^t dW(s) \quad (23)$$

sendo $W(t)$ um processo de Wiener e o último termo é chamado uma integral estocástica a qual não iremos definir. [3]

Visto que estamos lidando com um processo de Markov e como em todo processo de Markov a propriedade de Markov é simétrica em tempo, resulta que podemos escrever (22) na forma

$$dX(t) = X(t) - X(t-dt) = \mu_*(x,t)dt + dW_*(x,t) \quad (24)$$

onde $dW_*(x,t)$ representa o processo de Wiener na descrição ante-

rior e μ_* é a *velocidade média anterior* definida por:

$$\begin{aligned} \mu_*(x_2 t_2) &= \lim_{t_1 \rightarrow t_2^-} E \left[\frac{X_2(t_2) - X_1(t_1)}{t_2 - t_1} \middle| X_2(t_2) \right] \\ &= \lim_{t_1 \rightarrow t_2^-} \frac{1}{t_2 - t_1} \int [X_2(t_2) - X_1(t_1)] f_*(x_2 t_2 | x_1 t_1) dx_1 \end{aligned}$$

Pela equação (20) e para $X(t_2) = x_2$, $X(t_1) = x_1$

$$\begin{aligned} \mu_*(x_2 t_2) &= \lim_{t_1 \rightarrow t_2^-} \frac{1}{t_2 - t_1} \frac{1}{\rho(x_2 t_2)} \\ &\int (x_2 - x_1) \rho(x_1 t_1 | x_2 t_2) \rho(x_1 t_1) dx_1 \end{aligned} \quad (25)$$

Através das equações (A.3) e (A.4) conforme referência [6], podemos demonstrar que

$$\mu_*(x_2 t_2) = \mu(x_2 t_2) - \frac{1}{\rho(x_2 t_2)} \frac{\partial}{\partial x_2} \{ \sigma^2(x_2 t_2) \rho(x_2 t_2) \} \quad (25')$$

como uma primeira aproximação.

II.D) AS EQUAÇÕES DE FOKKER-PLANCK:

Neste parágrafo deduziremos as equações diferenciais que serão satisfeitas pela função densidade de probabilidade condicional, sob certas condições. Vamos seguir a demonstração feita em [8] .

Essas equações foram pela primeira vez estabelecidas de forma rigorosa por *A.N. Kolmogorov*, embora tenham ocorrido em tra

balhos ligados à Física.

Dizemos que um processo $X(t)$ é *fortemente contínuo*, se satisfaz a seguinte condição:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|y-x| \geq \delta} \frac{\partial}{\partial y} P(xt-\Delta t | yt) dy = 0 \quad (26)$$

para qualquer constante $\delta > 0$, onde $P(xt-\Delta t | yt)$ é a distribuição condicional.

No que segue assumiremos que:

$$1. \text{ As derivadas parciais } \text{i.) } \frac{\partial P(xt | y\tau)}{\partial x} \quad \text{ii.) } \frac{\sigma^2 P(xt | y\tau)}{\partial x^2}$$

existem e são contínuas para todos os valores t, x, y e τ , onde $\tau > t$.

2. Para $\delta > 0$ arbitrário existe os limites

$$\text{i. } \mu(xt) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|y-x| < \delta} (y-x) \left[\frac{\partial P(xt-\Delta t | yt)}{\partial y} \right] dy$$

$$\text{ii. } \sigma^2(xt) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|y-x| < \delta} (y-x)^2 \frac{\partial P(xt-\Delta t | yt)}{\partial y} dy$$

Isto posto, vamos demonstrar a primeira equação de *Fokker-Planck*, também conhecida como *equação F.P. anterior*.

Se as condições (26), 1 e 2 são satisfeitas, então a função $P(xt | y\tau)$ satisfaz a equação

$$\frac{\partial P(xt | y\tau)}{\partial t} = -\mu(xt) \frac{\partial P(xt | y\tau)}{\partial x} - \frac{1}{2} \sigma^2(xt) \frac{\partial^2 P(xt | y\tau)}{\partial x^2} \quad (26')$$

PROVA: Em virtude das propriedades da função de distribuição P , podemos facilmente demonstrar que

$$P(xt|y\tau) = \int P(xt|y\tau) \frac{\partial}{\partial z} P(xt-\Delta t|zt) dz \quad (27)$$

Subtraindo (11') (com $X(t-\Delta t)$ em lugar de $X(t)$ e t em lugar de s) de (27), temos

$$\begin{aligned} P(x(t-\Delta t)|y\tau) - P(xt|y\tau) &= \int P(zt|y\tau) \frac{\partial}{\partial z} P(xt-\Delta t|zt) dz \\ &- \int P(xt|y\tau) \frac{\partial}{\partial z} P(xt-\Delta t|zt) dz \end{aligned} \quad (28)$$

dividindo por Δt , temos:

$$\begin{aligned} \frac{P(xt-\Delta t|y\tau) - P(xt|y\tau)}{\Delta t} &= \frac{1}{\Delta t} \int [P(zt|y\tau) - P(xt|y\tau)] \cdot \\ &\cdot \frac{\partial}{\partial z} P(xt-\Delta t|zt) dz \end{aligned} \quad (29)$$

Desenvolvendo $P(zt|y\tau)$ em série de Taylor em z sobre o ponto x (a qual é possível pela condição 1) temos:

$$\begin{aligned} P(zt|y\tau) &= P(xt|y\tau) + (z-x) \frac{\partial}{\partial x} P(xt|y\tau) + \\ &+ \frac{1}{2} (z-x)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(xt|y\tau) + o((z-x)^2) \end{aligned} \quad (30)$$

Também podemos reescrever a equação (29) na forma

$$\begin{aligned} \frac{P(xt-\Delta t|y\tau) - P(xt|y\tau)}{\Delta t} &= \frac{1}{\Delta t} \int_{|z-x| \geq \delta} [P(zt|y\tau) - P(xt|y\tau)] \cdot \\ &\cdot \frac{\partial}{\partial z} P(xt-\Delta t|zt) dz + \frac{1}{\Delta t} \int_{|z-x| < \delta} [P(zt|y\tau) - P(xt|y\tau)] \cdot \\ &\cdot \frac{\partial}{\partial z} P(xt-\Delta t|zt) dz \end{aligned} \quad (31)$$

Substituindo (30) em (31) temos

$$\begin{aligned}
 & \frac{P(xt-\Delta t|y\tau) - P(xt|y\tau)}{\Delta t} = \tag{32} \\
 & = \frac{1}{\Delta t} \int_{|z-x| \geq \delta} [P(zt|y\tau) - P(xt|y\tau)] \frac{\partial P}{\partial z}(xt-\Delta t|zt) dz \\
 & + \frac{1}{\Delta t} \int_{|z-x| < \delta} [P(xt|y\tau) + (z-x) \frac{\partial}{\partial x} P(xt|y\tau) + \\
 & + \frac{1}{2} (z-x)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(xt|y\tau) + o((z-x)^2) - \\
 & - P(xt|y\tau)] \frac{\partial P}{\partial z}(xt-\Delta t|zt) dz = \\
 & = \frac{1}{\Delta t} \int_{|z-x| \geq \delta} [P(zt|y\tau) - P(xt|y\tau)] \cdot \\
 & \cdot \frac{\partial P}{\partial z}(xt-\Delta t|zt) dz + \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial}{\partial x} P(xt|y\tau) \cdot \\
 & \cdot \int_{|z-x| < \delta} (z-x) P(xt-\Delta t|zt) dz + \frac{1}{\Delta t} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 P(xt|y\tau)}{\partial x^2} \cdot \\
 & \cdot \int [z-x]^2 + o((z-x)^2)] P(xt-\Delta t|zt) dz
 \end{aligned}$$

Passando ao limite com $\Delta t \rightarrow 0$, o primeiro termo do lado direito fica

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|z-x| \geq \delta} [P(zt|y\tau) - P(xt|y\tau)] \cdot \frac{\partial P}{\partial z}(xt-\Delta t|zt) dz = 0$$

pela condição de continuidade (26) e usando o fato que o termo em

[] é limitado.

O segundo termo

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial P(x_t | y_\tau)}{\partial x} \int_{|z-x| < \delta} (z-x) \frac{\partial P}{\partial z} (x_t - \Delta t | z_t) dz$$

$$= \mu(x_t) \frac{\partial P(x_t | y_\tau)}{\partial x} \text{ . (pela condição (2.i))}$$

O terceiro termo, (pela condição (2.ii))

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 P(x_t | y_\tau)}{\partial x^2} \int_{|z-x| < \delta} [(z-x)^2 + o((z-x)^2)] \cdot$$

$$\frac{\partial P}{\partial z} (x_t - \Delta t | z_t) dz = \frac{1}{2} \sigma^2(x_t) \frac{\partial^2 P(x_t | y_\tau)}{\partial x^2} +$$

$$+ \int_{|z-x| < \delta} o((z-x)^2) \frac{\partial P(x_t - \Delta t | z_t)}{\partial z} dz$$

onde

$$\int_{|z-x| < \delta} o((z-x)^2) \frac{\partial P(x_t - \Delta t | z_t)}{\partial z} dz \rightarrow 0$$

com $\delta \rightarrow 0$.

Como $\frac{P(x_t - \Delta t | y_\tau) - P(x_t | y_\tau)}{\Delta t}$ não depende de δ , e os limites mencionados são independentes de δ , o limite do lado direito existe e é igual a

$$\mu(x_t) \frac{\partial P(x_t | y_\tau)}{\partial x} + \frac{1}{2} \sigma^2(x_t) \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x_t | y_\tau) \tag{33}$$

Portanto, concluímos que

4088/135

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{P(xt-\Delta t|y\tau) - P(xt|y\tau)}{\Delta t} = \frac{\partial}{\partial t} P(xt|y\tau)$$

existe. Assim temos demonstrado a equação (26').

□

Se assumimos que a função densidade $\rho(xt|y\tau) = \frac{\partial P(xt|y\tau)}{\partial y}$ existe, então é fácil demonstrar de (26') que a função densidade $\rho(xt|y\tau)$ satisfaz a equação

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(xt|y\tau) + \mu(xt) \frac{\partial}{\partial x} \rho(xt|y\tau) + \frac{1}{2} \sigma^2(xt) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(xt|y\tau) = 0 \quad (34)$$

Se multiplicamos a equação (34) por $\rho(xt)$, temos

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho(xt|y\tau)) \right] \rho(xt) + \mu(xt) \left[\frac{\partial}{\partial x} \rho(xt|y\tau) \right] \rho(xt) \quad (35)$$

$$\rho(xt) + \frac{1}{2} \sigma^2(xt) \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(xt|y\tau) \right] \rho(xt) = 0$$

integrando em relação a y , fica

$$\int \rho(xt) \frac{\partial}{\partial t} (\rho(xt|y\tau)) dy + \int \mu(xt) \rho(xt) \frac{\partial}{\partial x} \rho(xt|y\tau) dy \\ + \frac{1}{2} \int \sigma^2(xt) \rho(xt) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(xt|y\tau) dy = 0$$

Como estamos integrando com respeito a variável y , então

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \right] \quad \text{e} \quad \left[\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \right]$$

e ainda sabemos que

$$\int \rho(xt) \rho(xt|y\tau) dy = \rho(xt)$$

então temos:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(xt) + \mu(xt) \frac{\partial}{\partial x} \rho(xt) + \frac{1}{2} \sigma^2(xt) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(xt) = 0 \quad (36)$$

a qual é a expressão mais usada da equação de *Fokker Planck anterior*.

Derivaremos agora a segunda equação de *Fokker-Planck*, também chamada *equação de Fokker-Planck posterior*. (Equação (37) abaixo.)

Para isso, além das condições impostas (26) 1 e 2, incluímos as restrições:

3. A função densidade existe, isto é:

$$\frac{\partial P(xt|y\tau)}{\partial y} = \rho(xt|y\tau)$$

4. As derivadas seguintes existem e são contínuas.

- i. $\frac{\partial \rho(xt|y\tau)}{\partial \tau}$
- ii. $\frac{\partial}{\partial y} [\mu(y\tau) P(xt|y\tau)]$
- iii. $\frac{\partial^2}{\partial y^2} [\sigma^2(y\tau) P(xt|y\tau)]$.

Assim a função densidade de probabilidade $\rho(xt|y\tau)$ satisfaz a equação de *Fokker-Planck posterior*.

$$\frac{\partial \rho(xt|y\tau)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial y} [\mu(y\tau) \rho(xt|y\tau)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} [\sigma^2(y\tau) \rho(xt|y\tau)] \quad (37)$$

PROVA: Seja a e b ($a < b$) dois números quaisquer e $R(y)$ uma função contínua até a segunda ordem. Consideremos $R(y) = 0$ para

$y < a$ e $y < b$, e pela sua condição de continuidade e da condição da sua derivada, concluimos que

$$R(a) = R(b) = R'(a) = R'(b) = R''(a) = R''(b) = 0 \quad (38)$$

onde R' é a primeira derivada e R'' é a segunda derivada.

Notemos que

$$\begin{aligned} \int_a^b \frac{\partial}{\partial \tau} \rho(xt|y\tau) R(y) dy &= \frac{\partial}{\partial \tau} \int_a^b \rho(xt|y\tau) R(y) dy \quad (39) \\ &= \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \int \frac{\rho(xt|y\tau+\Delta\tau) - \rho(xt|y\tau)}{\Delta\tau} \cdot R(y) dy . \end{aligned}$$

De acordo com a equação generalizada de Markov (11') temos

$$\rho(xt|y\tau+\Delta\tau) = \int \rho(xt|z\tau) \rho(z\tau|y\tau+\Delta\tau) dz \quad (40)$$

e assim a equação (39) torna-se

$$\begin{aligned} \int_a^b \frac{\partial}{\partial \tau} \rho(xt|y\tau) R(y) dy &= \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta\tau} \left[\int \left[\int \left[\rho(xt|z\tau) \rho(z\tau|y\tau+\Delta\tau) dz \right. \right. \right. \quad (41) \\ &- \left. \left. \left. \rho(xt|y\tau) \right] R(y) dy \right] = \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta\tau} \left[\int \left[\int \left[\rho(xt|z\tau) \rho(z\tau|y\tau+\Delta\tau) \cdot \right. \right. \right. \\ &\left. \left. \left. \cdot R(y) dz dy - \int \rho(xt|y\tau) R(y) dy \right] \right] \end{aligned}$$

Mudando a ordem de integração $dy \rightarrow dz$ e depois as variáveis de integração, y por e e z por y , temos

$$\begin{aligned} \int_a^b \frac{\partial}{\partial \tau} \rho(xt|y\tau) R(y) dy &= \quad (42) \\ &= \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta\tau} \left[\int \rho(xt|z\tau) \int \rho(z\tau|y\tau+\Delta\tau) R(y) dy dz \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & - \int \rho(x_t|y_t) R(y) dy \\
 & = \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta\tau} \left[\int \int \rho(x_t|y_t) \rho(y_t|z_t+\Delta\tau) \cdot R(z) dz dy \right. \\
 & - \int \rho(x_t|y_t) R(y) dy \\
 & = \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta\tau} \int \rho(x_t|y_t) \left[\int \rho(y_t|z_t+\Delta\tau) \cdot \right. \\
 & \left. \left. \cdot R(z) dz - R(y) \right] dy
 \end{aligned}$$

Pela fórmula de Taylor, temos:

$$R(z) = R(y) + (z-y)R'(y) + \frac{1}{2} (z-y)^2 R''(y) + \theta((z-y)^2) \quad (43)$$

e em virtude da função $R(z)$ ser limitada e pela condição (26)

$$\int_{|y-z| \geq \delta} \rho(y_t|z_t+\Delta\tau) R(z) dz = \theta(\Delta\tau) \quad (44)$$

De fato, $R(z)$ é limitada, então $R(z) \leq K$; portanto

$$\begin{aligned}
 \int_{|y-z| \geq \delta} \rho(y_t|z_t+\Delta\tau) dz & \leq \int_{|y-z| \geq \delta} \rho(y_t|z_t+\Delta\tau) K dz \\
 & = K \int_{|y-z| \geq \delta} \rho(y_t|z_t+\Delta\tau) dz \\
 & = \theta(\Delta\tau)
 \end{aligned}$$

e

$$\int_{|y-z| < \delta} \rho(y_t|z_t+\Delta\tau) dz = 1 + \theta(\Delta\tau) \quad (45)$$

Com efeito,

$$\int_{|y-z| \geq \delta} \rho(y\tau | z\tau + \Delta\tau) dy + \int_{|y-z| < \delta} \rho(y\tau | z\tau + \Delta\tau) dz = 1$$

Pela equação (45), temos ,

$$1 + \theta(\Delta\tau) = \int_{|y-z| < \delta} \rho(y\tau | z\tau + \Delta\tau) dz$$

então através das equações (43), (44) e (45), segue que a integral da equação (42)

$$\begin{aligned} & \int \rho(y\tau | z\tau + \Delta\tau) R(z) dz - R(y) = \int \{ \rho(y\tau | z\tau) \left[R(y) + (z-y) R'(y) + \right. \\ & \left. \frac{1}{2} (z-y)^2 R''(y) + o((z-y)^2) \right] \} dz - R(y) = \\ & = R'(y) \int_{|y-z| < \delta} (z-y) \rho(y\tau | z\tau + \Delta\tau) dz + \\ & \frac{1}{2} R''(y) \int_{|y-z| < \delta} [(z-y)^2 + \theta((z-y)^2)] \rho(y\tau | z\tau + \Delta\tau) dy + \theta(\Delta\tau) \end{aligned}$$

Assim de (42) segue que

$$\int_a^b \frac{\partial}{\partial \tau} \rho(x\tau | y\tau) R(y) dy = \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta\tau} \int \rho(x\tau | y\tau) \{ R'(y) \int_{|y-z| < \delta} (z-y) \cdot \quad (46)$$

$$\cdot \rho(y\tau | z\tau + \Delta\tau) dz +$$

$$\frac{1}{2} R''(y) \int_{|y-z| < \delta} [(z-y)^2 + \theta(z-y)^2] \rho(y\tau | z\tau + \Delta\tau) dz + \theta(\Delta\tau) \} dz$$

Aplicando o limite com $\Delta\tau \rightarrow 0$ e pelas condições 1 e 2, concluimos que a igualdade anterior, isto é, a equação (46) pode ser escrita na forma :

$$\int_a^b \frac{\partial}{\partial \tau} \rho(xt|y\tau) R(y) dy = \quad (47)$$

$$= \int \rho(xt|y\tau) \left[\mu(y\tau) R'(y) + \frac{1}{2} \sigma^2(y\tau) R''(y) \right] dy$$

onde desprezamos os termos $o((z-y)^2)$ e $o(D\tau)$.

Mas como $R'(y) = R''(y) = 0$ para $y \leq a$ e $y \geq b$, segue que

$$\int_a^b \frac{\partial}{\partial \tau} \rho(xt|y\tau) R(y) dy = \quad (48)$$

$$= \int_a^b \rho(xt|y\tau) \left[\mu(y\tau) R'(y) + \frac{1}{2} \sigma^2(y\tau) R''(y) \right] dy$$

fazendo agora integração por partes e pela igualdade (38), encontramos:

$$\int_a^b \rho(xt|y\tau) \mu(y\tau) R'(y) dy = \quad (49)$$

$$= - \int_a^b R(y) \frac{\partial}{\partial y} [\mu(y\tau) \rho(xt|y\tau)] dy$$

e

$$\int_a^b \rho(xt|y\tau) \sigma^2(y\tau) R''(y) dy = \quad (50)$$

$$= \int_a^b R(y) \frac{\partial^2}{\partial y^2} [\sigma^2(y\tau) \rho(xt|y\tau)] dy$$

Substituindo as expressões (49) e (50) em (47), obtemos

$$\int_a^b \frac{\partial}{\partial \tau} \rho(xt|y\tau) R(y) dy = \int_a^b \left\{ -\frac{\partial}{\partial y} [\mu(y\tau) \rho(xt|y\tau) + \right. \quad (51)$$

$$\left. \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} [\sigma^2(y\tau) \rho(xt|y\tau)] \right\} R(y) dy = 0$$

Como $R(y)$ é uma função arbitrária, então construímos a equação (37), a qual é a equação de Fokker-Planck posterior

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \rho(xt|y\tau) + \frac{\partial}{\partial y} [\mu(y\tau) \rho(xt|y\tau)] \quad (52)$$

$$- \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} [\sigma^2(y\tau) \rho(xt|y\tau)] = 0$$

□

Agora multiplicando (52) por $\rho(xt)$ e integrando com respeito a x temos

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \rho(y\tau) + \frac{\partial}{\partial y} [\mu(y\tau) \rho(y\tau)] - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} [(\sigma^2(y\tau) \rho(y\tau))] = 0$$

pois

$$\int \rho(xt|y\tau) \rho(xt) dx = \rho(y\tau)$$

Podemos reescrever trocando y por x e τ por t ,

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(xt) + \frac{\partial}{\partial x} [\mu(xt) \rho(xt)] - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [\sigma^2(xt) \rho(xt)] = 0 \quad (53)$$

a qual é a forma da equação de Fokker-Planck posterior que vamos usar no capítulo III deste trabalho.

II.E) ALGUMAS CONSIDERAÇÕES:

O importante aqui, não é verificar se uma função $\rho(xt)$ satisfaz as equações de Fokker-Planck, mas sim, determinar $\rho(xt)$,

quando os coeficientes $\mu(xt)$ e $\sigma^2(xt)$ são conhecidos. Onde $\mu(xt)$ é a média da variação do processo durante o tempo Δt e $\sigma^2(xt)$ é a variância.

Para processos de Wiener o qual vimos no parágrafo (2.C) onde $\mu(xt) = 0$ e $\sigma^2(xt) = 1$, as equações de Fokker-Planck tornam-se

$$\frac{\partial \rho(xt)}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \rho(xt)}{\partial y^2} \quad (\text{Eq. F. Planck posterior}) \quad (54)$$

$$\frac{\partial \rho(xt)}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \rho(xt)}{\partial x^2} \quad (\text{Eq. F. Planck anterior}) \quad (55)$$

CAPÍTULO III

MECÂNICA QUÂNTICA E PROCESSOS ESTOCÁSTICOS

III.A) INTRODUÇÃO:

Como já dissemos na introdução geral deste trabalho, desde os primórdios da Mecânica Quântica, muitas tentativas têm sido feitas para encontrar algum tipo de interpretação clássica. Com este propósito, tornou-se muito importante o paralelismo observado entre *Mecânica Quântica* e *Processo Estocástico*.

Muitas investigações foram feitas neste sentido, porém, um resultado importante consiste no fato que tem sido possível provar que para todo ψ que satisfaz a equação de Schrödinger, existe um processo de Markov no espaço de configuração onde a densidade de probabilidade $\rho(\vec{x}, t)$ de encontrar a partícula em $\vec{x}$ no tempo t , coincide com a densidade de probabilidade da Mecânica Quântica $|\psi(\vec{x}, t)|^2$. Por esta razão é possível fazer uma descrição clássica da equação de Schrödinger, permitindo uma interpretação natural da evolução de um sistema quântico em termos dos conceitos clássicos.

Neste capítulo, faremos a derivação da equação de Schrödinger, seguindo Nelson [6], analisando a equivalência entre as derivações estocástica e quântica da evolução dos sistemas físicos. Vamos dar referência que discutem as limitações deste ponto de vista nas observações finais.

III.B) MAIS PRELIMINARES MATEMÁTICOS:

Introduziremos neste parágrafo, conceitos e equações básicas, que além do já exposto nos capítulos I e II deste trabalho,

serão necessários no desenvolvimento do parágrafo seguinte.

A derivada média de $f(X(t), t)$ pode ser definida de dois modos diferentes, conforme for adotada a descrição posterior (para frente) ou a descrição anterior (para trás). Seguindo Nelson [6], definimos:

$$Df(X(t), t) = \lim_{dt \rightarrow 0^+} E_{X(t)} [f(X(t+dt), t+dt) - f(X(t), t)] / dt \quad (1)$$

Fazendo $x' = X(t+dt)$, $t' = t+dt$ e $x = X(t)$, a mesma pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned} Df(X(t), t) &= \lim_{dt \rightarrow 0^+} E_{X(t)} [f(x', t') - f(x, t)] / dt \quad (1') \\ &= \lim_{t' \rightarrow t^+} \int \{ [f(x', t') - f(x, t)] / (t' - t) \} p(x, t | x', t') dx' \end{aligned}$$

$Df(X(t), t)$ é chamada a *derivada média posterior* (ou para frente) .

Similarmente definimos

$$\begin{aligned} D_{*}f(X(t), t) &= \lim_{dt \rightarrow 0^+} E_{X(t)} [f(X(t), t) - f(X(t-dt), t-dt)] / dt \\ &= \lim_{dt \rightarrow 0^+} E_{X(t)} [f(x, t) - f(x', t')] / dt \end{aligned}$$

onde $x = X(t)$, $x' = X(t-dt)$ e $t' = t-dt$, ou ainda

$$\begin{aligned} D_{*}f(X(t), t) &= \lim_{t' \rightarrow t^-} \int \{ [f(x, t) - f(x', t')] / (t - t') \} \\ &\quad p_{*}(x, t | x', t') dx' \end{aligned} \quad (2)$$

$D_{*}f(X(t), t)$ é chamada *derivada média anterior* (para trás) .

Daremos agora, uma expressão explícita para as derivadas

definidas em (1) e (2). Para isto, consideremos a expansão de Taylor de $f(x't')$ em torno do ponto (xt) , onde $x' = X(t+dt)$ e $t' = t+dt$.

$$\begin{aligned} f(x't') - f(xt) &= \frac{\partial f}{\partial t} (t'-t) + \frac{\partial f}{\partial x} (x'-x) + \\ &+ \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} (t'-t)^2 + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} (x'-x)^2 + \dots \end{aligned} \quad (3)$$

Inserindo esta expressão na equação (1') temos:

$$\begin{aligned} Df(X(t), t) &= \lim_{t' \rightarrow t^+} \int \rho(xt|x't') dx' \\ &\cdot \left\{ \left[\frac{\partial f(xt)}{\partial t} (t'-t) + \frac{\partial f(xt)}{\partial x} (x'-x) + \right. \right. \\ &\left. \left. \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 f(xt)}{\partial t^2} (t'-t)^2 + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 f(xt)}{\partial x^2} (x'-x)^2 + \dots \right] / (t'-t) \right\} \\ &= \lim_{t' \rightarrow t^+} \int \rho(xt|x't') dx' \frac{\partial f(xt)}{\partial t} + \\ &+ \lim_{t' \rightarrow t^+} \int \rho(xt|x't') \frac{\partial f(xt)}{\partial x} (x'-x) + \\ &+ \lim_{t' \rightarrow t^+} \frac{1}{2!} \int \rho(xt|x't') dx' \frac{\partial^2 f(xt)}{\partial t^2} (t'-t)^2 + \\ &+ \lim_{t' \rightarrow t^+} \frac{1}{2!} \int \rho(xt|x't') dx' \frac{\partial^2 f(xt)}{\partial x^2} (x'-x)^2 + \dots \\ &= \frac{\partial f(xt)}{\partial t} + \frac{\partial f(xt)}{\partial x} \lim_{t' \rightarrow t^+} \int \rho(xt|x't') \frac{(x'-x)}{(t'-t)} dx' \\ &+ \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(xt)}{\partial t^2} \lim_{t' \rightarrow t^+} \int \rho(xt|x't') (t'-t) dx' \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(xt)}{\partial x^2} \lim_{t' \rightarrow t^+} \int \rho(xt|x't') \frac{(x'-x)^2}{(t'-t)} dx' \\
& = \frac{\partial f(xt)}{\partial t} + \frac{\partial f(xt)}{\partial x} \mu(xt) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(xt)}{\partial x^2} \sigma^2(xt)
\end{aligned}$$

então

$$Df(X(t), t) = \frac{\partial f(xt)}{\partial t} + \frac{\partial f(xt)}{\partial x} \mu(xt) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(xt)}{\partial x^2} \sigma^2(xt) \quad (4)$$

□

Consideremos agora a expansão de Taylor de $f(xt)$, em torno do ponto $(x't')$ onde $x' = X(t-dt)$, $x = X(t)$ e $t' = t-dt$.

$$\begin{aligned}
f(xt) - f(x't') & = + \frac{\partial f(x't')}{\partial t} (t-t') + \quad (5) \\
& + \frac{\partial f}{\partial x} (x't') (x-x') + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(x't')}{\partial t^2} (t-t')^2 + \\
& + \frac{1}{2} \frac{\partial f}{\partial x^2} (x-x')^2 + \dots
\end{aligned}$$

Inserindo (5) em (2), temos

$$\begin{aligned}
D_* f(X(t), t) & = \lim_{t' \rightarrow t^-} \int_* \rho(xt|x't') dx' \quad (6) \\
& \cdot \left\{ \left[\frac{\partial f(x't')}{\partial t} (t-t') + \frac{\partial f}{\partial x} (x't') (x-x') + \right. \right. \\
& \left. \left. \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(x't')}{\partial x^2} (x-x')^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} (t-t')^2 + \dots \right] / (t-t') \right\} \\
& = + \frac{\partial f(x't')}{\partial t} \lim_{t' \rightarrow t^-} \int_* \rho(xt|x't') dx' \\
& + \frac{\partial f(x't')}{\partial x} \lim_{t' \rightarrow t^-} \int_* \rho(xt|x't') dx' .
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot \frac{(x-x')}{dt} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(x't')}{\partial t^2} \int \rho_*(xt|x't') dx' dt \\
& - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(x't')}{\partial x^2} \int \rho_*(xt|x't') dx' \frac{(x-x')^2}{dt} + \dots \\
& = \frac{\partial f(x't')}{\partial t} + \frac{\partial f(x't')}{\partial x} \mu_*(xt) - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(x't')}{\partial x^2} \sigma_*^2(xt)
\end{aligned}$$

então

$$D_* f(X(t), t) = \frac{\partial f(x't')}{\partial t} + \frac{\partial f(x't')}{\partial x} \mu_*(xt) - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(x't')}{\partial x^2} \sigma_*^2(xt)$$

□

No caso que $f(X(t), t)$ temos

$$D_* X(t) = \mu_*(xt) \quad (7)$$

$$DX(t) = \mu(xt) \quad (8)$$

Veremos a seguir as equações básicas dos processos estocásticos, quando a variável aleatória X é um vetor.

Neste caso, a velocidade posterior μ será um vetor $\vec{\mu}$ e a variância σ^2 um tensor de ordem dois σ_{ij}^2 .

As equações (22) e (24) do capítulo II, tornam-se

$$d\vec{X}(t) = \vec{X}(t+dt) - \vec{X}(t) = \vec{\mu}(\vec{x}t) dt + d\vec{W}(\vec{x}t) \quad (9)$$

$$d\vec{X}(t) = \vec{X}(t) - X(t-dt) = \vec{\mu}_*(\vec{x}t) dt + d\vec{W}_*(\vec{x}t) \quad (10)$$

onde a velocidade posterior instant. $\vec{\mu}$ e a variância são caracterizadas por

$$E_{X(t)} [dX(t)] = \vec{\mu}(\vec{x}t) dt \quad (11)$$

$$E_{X(t)} [dx_i - \mu_i dt] (dx_j - \mu_j dt) = \sigma_{ij}^2(\vec{x}t) dt \quad (12)$$

Quando as componentes da variável aleatória $\vec{X}$ não estão

correlacionadas, a variância fica

$$\sigma_{ij}^2(\vec{x}t) = \sigma_i^2(\vec{x}t) \delta_{ij} \quad (13)$$

Ainda se o espaço das variáveis é isotrópico e homogêneo em tempo, temos

$$\sigma^2(\vec{x}t) = \sigma^2 \quad (14)$$

o que passaremos a considerar.

Assim a equação (25'), capítulo II, torna-se

$$\vec{\mu}_*(\vec{x}t) = \vec{\mu}(\vec{x}t) - \sigma^2 [\text{grad } \rho(\vec{x}t)] / \rho(\vec{x}t) \quad (15)$$

As equações de Fokker-Plank (36) e (53) podem ser expressas como:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}t) + \text{div} (\mu_*(\vec{x}t) \rho(\vec{x}t)) + \frac{1}{2} \sigma^2 \nabla^2 \rho(\vec{x}t) = 0 \quad (16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} r(\vec{x}t) + \text{div} [\mu(\vec{x}t) r(\vec{x}t)] - \frac{1}{2} \sigma^2 \nabla^2 r(\vec{x}t) = 0 \quad (17)$$

Adicionando (16) a (17) obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(\vec{x}t)}{\partial t} &= -\text{div} [\rho(\vec{x}t) (\vec{\mu}_*(\vec{x}t) + \vec{\mu}(\vec{x}t))] \\ &= -\text{div} [\rho(\vec{x}t) \vec{v}(\vec{x}t)] \end{aligned} \quad (18)$$

onde

$$\vec{v}(\vec{x}t) = \frac{1}{2} (\vec{\mu}(\vec{x}t) + \vec{\mu}_*(\vec{x}t)) \quad (19)$$

é a *velocidade corrente* e

$$\frac{\partial \rho(\vec{x}t)}{\partial t} = -\text{div} [\rho(\vec{x}t) \vec{v}(\vec{x}t)] \quad (20)$$

é a *equação de continuidade*.

Sendo a *velocidade estocástica* definida por

$$\vec{u}(\vec{x}t) = \frac{1}{2} (\vec{\mu}(\vec{x}t) - \mu_*(\vec{x}t)) \quad (21)$$

segue-se que

$$\vec{\mu}(\vec{x}t) = 2 \vec{u}(\vec{x}t) + \vec{\mu}_*(\vec{x}t) \quad (22)$$

Usando agora (15) temos

$$\vec{\mu}(\vec{x}t) = 2\vec{u}(\vec{x}t) + \vec{\mu}(\vec{x}t) - \sigma^2 (\text{grad } \rho(\vec{x}t)) / \rho(\vec{x}t)$$

então

$$\vec{u}(\vec{x}t) = \frac{\sigma^2}{2} (\text{grad } (\ln \rho(\vec{x}t))) \quad (23)$$

As equações (16), (17) e (23) são as *equações básicas* para a *descrição* de um *processo de Markov* simétrico em tempo.

Observemos ainda que se conhecemos σ^2 , $\rho(\vec{x}t)$ e $\vec{v}(\vec{x}t)$, podemos determinar $\vec{u}(\vec{x}t)$ por (23) e os termos $\vec{\mu}(\vec{x}t)$ e $\vec{\mu}_*(\vec{x}t)$ através das equações (24) abaixo descritas, as quais são obtidas das equações (19) e (21) por adição e subtração, respectivamente.

$$\begin{cases} \vec{\mu}(\vec{x}t) = \vec{v}(\vec{x}t) + \vec{u}(\vec{x}t) \\ \vec{\mu}_*(\vec{x}t) = \vec{v}(\vec{x}t) - \vec{u}(\vec{x}t) \end{cases} \quad (24)$$

Se admitimos que a densidade de probabilidade $\rho(xt_0)$ e σ^2 são conhecidas e as velocidades posteriores $\vec{v}(\vec{x}t)$ são dadas em todos os tempos t , então a equação de Fokker-Planck posterior determina a densidade de probabilidade em qualquer tempo, uma vez que o processo seja completamente determinado.

III.C) DERIVAÇÃO ESTOCÁSTICA DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER:

Mostraremos a seguir a equivalência da equação de Schrödinger com um dado processo de Markov. Através desta equivalência é que se explica a evolução quântica dos sistemas físicos como a

evolução de um dado processo de Markov.

Para isto, torna-se necessário introduzir algumas hipóteses dinâmicas conectando $\rho(\vec{x}t)$ e $\vec{v}(\vec{x}t)$ e explicar a situação dinâmica, isto é, as forças que atuam no sistema.

Uma forma natural é assumir a validade da Lei de Newton $\vec{F} = m\vec{a}$, onde $\vec{a}$ é chamada a aceleração média, $m =$ massa e $\vec{F} =$ força.

Segundo Nelson [6], definimos *aceleração média* como

$$\vec{a} = \frac{1}{2} (DD_* + D_* D) X(t) \quad (25)$$

(pois devido a existência de dois tipos de derivadas médias, a posterior e a anterior, temos várias formas de definir uma aceleração e impomos como *condição dinâmica* a 2a. Lei Newton na forma:

$$\frac{1}{2} (DD_* + D_* D) \vec{X}(t) = \frac{\vec{F}}{m} \quad (26)$$

Através das equações (4), (6), (7) e (8), temos

$$\begin{aligned} DD_* \vec{X}(t) &= D \vec{\mu}_* (\vec{x}t) \quad (27) \\ &= \left[\frac{\partial}{\partial t} + \vec{\mu}(\vec{x}t) \cdot \text{grad} - \frac{\sigma^2}{2} \nabla^2 \right] \vec{\mu}_* (\vec{x}t) \\ &= \frac{\partial \vec{\mu}_* (\vec{x}t)}{\partial t} + \vec{\mu}(\vec{x}t) \cdot \text{grad} \vec{\mu}_* (\vec{x}t) + \frac{\sigma}{2} \nabla^2 \vec{\mu}_* (\vec{x}t) , \end{aligned}$$

$$e \quad D_* D \vec{X}(t) = D \vec{\mu} (\vec{x}t) \quad (28)$$

$$\begin{aligned} &= \left[\frac{\partial}{\partial t} + \vec{\mu}_* (\vec{x}t) \cdot \text{grad} - \frac{\sigma^2}{2} \nabla^2 \right] \vec{\mu} (\vec{x}t) \\ &= \frac{\partial \vec{\mu} (\vec{x}t)}{\partial t} + \vec{\mu}_* (\vec{x}t) \cdot \text{grad} \vec{\mu} (\vec{x}t) - \frac{\sigma^2}{2} \nabla^2 \vec{\mu} (\vec{x}t) \end{aligned}$$

onde ∇^2 é o Laplaciano.

Somando (27) a (28) e multiplicando ambos os lados por $1/2$, fica,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} [DD_{\star} + D_{\star} D] \vec{X}(t) &= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial \vec{\mu}_{\star}(\vec{x}t)}{\partial t} + \frac{\partial \vec{\mu}(\vec{x}t)}{\partial t} + \right. \\ &\vec{\mu}(\vec{x}t) \cdot \text{grad } \vec{\mu}_{\star}(\vec{x}t) + \vec{\mu}_{\star}(\vec{x}t) \cdot \text{grad } \vec{\mu}(\vec{x}t) + \\ &\left. + \frac{\sigma^2}{2} \nabla^2 (\vec{\mu}_{\star}(\vec{x}t) - \vec{\mu}(\vec{x}t)) \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\vec{\mu}_{\star}(\vec{x}t) + \vec{\mu}(\vec{x}t)) + \vec{\mu}(\vec{x}t) \cdot \text{grad } \vec{\mu}_{\star}(\vec{x}t) + \vec{\mu}_{\star}(\vec{x}t) \cdot \text{grad } \vec{\mu}(\vec{x}t) \right. \\ &\left. - \frac{\sigma^2}{2} \nabla^2 (-\vec{\mu}_{\star}(\vec{x}t) + \vec{\mu}(\vec{x}t)) \right] \end{aligned} \quad (29)$$

Agora substituindo nesta, as equações (19) e (21) temos

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} [DD_{\star} + D_{\star} D] &= \frac{\partial}{\partial t} \vec{v}(\vec{x}t) + \\ + \frac{1}{2} [\vec{\mu}(\vec{x}t) \cdot \text{grad } \vec{\mu}_{\star}(\vec{x}t) + \vec{\mu}_{\star}(\vec{x}t) \cdot \text{grad } \vec{\mu}(\vec{x}t)] &- \frac{\sigma^2}{2} \nabla^2 u \end{aligned} \quad (30)$$

Inserindo (24) em (30)

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} [DD_{\star} + D_{\star} D] \vec{X}(t) &= \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \frac{1}{2} [(\vec{v} + \vec{u}) \cdot \text{grad } (\vec{v} - \vec{u}) + \\ &+ (\vec{v} - \vec{u}) \cdot \text{grad } (\vec{v} + \vec{u})] - \frac{\sigma^2}{2} \nabla^2 \vec{u} \end{aligned} \quad (31)$$

Façamos agora a resolução em (31) da expressão

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2} [(\vec{v} + \vec{u}) \cdot \text{grad } (\vec{v} - \vec{u}) + \frac{1}{2} (\vec{v} - \vec{u}) \cdot \text{grad } (\vec{v} + \vec{u})] \\ &= \frac{1}{2} \vec{v} \cdot \text{grad } (\vec{v} - \vec{u}) + \frac{1}{2} \vec{u} \cdot \text{grad } (\vec{v} - \vec{u}) + \\ &\quad + \frac{1}{2} \vec{v} \cdot \text{grad } (\vec{v} + \vec{u}) - \frac{1}{2} \vec{u} \cdot \text{grad } (\vec{v} + \vec{u}) \\ &= \frac{1}{2} \vec{v} \cdot \text{grad } \vec{v} - \frac{1}{2} \vec{v} \cdot \text{grad } \vec{u} + \frac{1}{2} \vec{u} \cdot \text{grad } \vec{v} - \\ &\quad - \frac{1}{2} \vec{u} \cdot \text{grad } \vec{u} + \frac{1}{2} \vec{v} \cdot \text{grad } \vec{v} + \frac{1}{2} \vec{v} \cdot \text{grad } \vec{u} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & - \frac{1}{2} \vec{u} \cdot \text{grad } \vec{v} - \frac{1}{2} \vec{u} \text{ grad } \vec{u} \\
 & = \vec{v} \cdot \text{grad } \vec{v} - \vec{u} \text{ grad } \vec{u}
 \end{aligned}$$

Então a equação (31) torna-se

$$\frac{1}{2} [D D_* + D_* D] \vec{X}(t) = \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \text{grad } \vec{v} - \vec{u} \text{ grad } \vec{u} - \frac{\sigma^2}{2} \nabla^2 \vec{u} \quad (32)$$

a qual é a expressão da *aceleração média*. □

Substituindo a equação (32) em (26) (condição dinâmica), temos

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \text{grad}) \vec{v} - (\vec{u} \cdot \text{grad}) \vec{u} - \frac{\sigma^2}{2} \nabla^2 \vec{u} = \frac{\vec{F}}{m}$$

e daí,

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = \frac{\vec{F}}{m} - (\vec{v} \cdot \text{grad}) \vec{v} + (\vec{u} \cdot \text{grad}) \vec{u} + \frac{\sigma^2}{2} \nabla^2 \vec{u} \quad (33)$$

que é a *equação dinâmica da Mecânica Estocástica*. Esta, juntamente com a equação de continuidade (20) $\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\text{div}(\rho \vec{v})$, formam o conjunto de equações básicas que caracterizam completamente o Processo de Markov. Pois se considerar $\rho(\vec{x}, t_0)$, $\vec{v}(\vec{x}, t_0)$ e σ^2 determinados valores iniciais, podemos determinar $\vec{u}(\vec{x}, t_0)$ pela equação (23) e então podemos resolver o sistema de equações (33), (20) para $\rho(\vec{x}, t)$ e $\vec{v}(\vec{x}, t)$ para todo t .

Veremos agora, a equivalência do sistema acima mencionado com a equação de Schrödinger.

Antes porém, façamos algumas considerações.

Seja

$$R(\vec{x}, t) = \frac{1}{2} \ln \rho(\vec{x}, t) \quad (34)$$

de forma que a equação (23) torna-se

$$\vec{u}(\vec{x}t) = \sigma^2 \text{grad } R(\vec{x}t) \quad (35)$$

e o campo de velocidade corrente, um gradiente, então existe $S(\vec{x}t)$ tal que

$$\vec{v}(\vec{x}t) = \sigma^2 \text{grad } S(\vec{x}t) \quad (36)$$

onde S é uma função arbitrária definida como uma função aditiva do tempo.

Seja $\vec{F} = -\text{grad } V(\vec{x})$, ($V(\vec{x})$ potencial) e de (34)

$$R(\vec{x}t) = \frac{1}{2} \ln \rho(\vec{x}t)$$

então

$$2R(\vec{x}t) = \ln \rho(\vec{x}t)$$

e daí

$$\rho(\vec{x}t) = e^{2R(\vec{x}t)}$$

então

$$\frac{\partial \rho(\vec{x}t)}{\partial t} = 2 e^{2R(\vec{x}t)} \cdot \frac{\partial R(\vec{x}t)}{\partial t} = 2\rho(\vec{x}t) \frac{\partial R(\vec{x}, t)}{\partial t}$$

portanto

$$\frac{\partial \rho(\vec{x}t)}{\partial t} = 2 \rho(\vec{x}t) \frac{\partial R(\vec{x}t)}{\partial t} \quad (37)$$

Pela equação (36) e usando $\rho = e^{2R}$ temos que

$$\text{div}(\rho \vec{v}) = \text{div}(e^{2R} \sigma^2 \text{grad } S) = \sigma^2 \text{div}(\rho \text{grad } S)$$

Sabemos que

$$\text{div}(a\vec{u}) = a \text{div } \vec{u} + \vec{u} \cdot \text{grad } a$$

Então

$$\text{div}(\rho \text{grad } S) = \rho \text{div grad } S + \text{grad } S \cdot \text{grad } \rho$$

logo

$$\text{div}(\rho \vec{v}) = \sigma^2 [\rho \text{div grad } S + \text{grad } S \cdot \text{grad } \rho]$$

$$= \sigma^2 [\rho \nabla^2 S + \text{grad } S \cdot \text{grad } \rho]$$

Mas

$$\text{grad } \rho = \text{grad } e^{2R} = 2 \nabla R \cdot \rho = 2\rho \text{ grad } R$$

então

$$\text{div } (\rho \vec{v}) = \sigma^2 [\rho \nabla^2 S + \text{grad } S \cdot 2\rho \text{ grad } R] \quad (38)$$

Comparando (20), (37) e (38), concluímos que

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 2\rho \frac{\partial R}{\partial t} = -\sigma^2 [\rho \nabla^2 S + 2\rho \text{ grad } S \cdot \text{grad } R] \quad (39)$$

Dividindo por 2ρ , temos

$$\frac{\partial R}{\partial t} = -\frac{\sigma^2}{2} [\nabla^2 S + \text{grad } S \cdot \text{grad } R]$$

portanto

$$\frac{\partial R}{\partial t} = -\frac{\sigma^2}{2} \nabla^2 S - \sigma^2 \text{ grad } S \cdot \text{grad } R \quad \square \quad (40)$$

Agora, derivando (36) em relação a t , temos

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = \sigma^2 \frac{\partial}{\partial t} \text{ grad } S(\vec{x}t) = \sigma^2 \text{ grad } \left(\frac{\partial S}{\partial t} \right) \quad (41)$$

Substituindo (41) em (33) e considerando $\vec{F} = -\text{grad } V(x)$,

fica

$$\begin{aligned} \sigma^2 \text{ grad } \frac{\partial S}{\partial t} &= \frac{1}{m} \text{ grad } V(\vec{x}) + (\vec{u} \cdot \text{grad}) \vec{u} - \\ &\quad - (\vec{v} \cdot \text{grad}) \vec{v} + \frac{\sigma^2}{2} \nabla^2 \vec{u} \\ &= \frac{1}{m} \text{ grad } V(x) + (\sigma^2 \text{ grad } R \cdot \text{grad}) \cdot \\ &\quad \cdot \sigma^2 \text{ grad } R - (\sigma^2 \text{ grad } S \cdot \text{grad}) \sigma^2 \text{ grad } S \\ &\quad + \frac{\sigma^2}{2} \nabla^2 (\sigma^2 \text{ grad } R) \end{aligned}$$

onde $\vec{u}$ e $\vec{v}$ foram tomados conforme as equações (35) e (36).

Portanto

$$\text{grad } \frac{\partial S}{\partial t} = \text{grad} \left[-\frac{1}{\sigma^2 m} V(\vec{x}) + \sigma^2 (\text{grad } R \cdot \text{grad } R) \right. \\ \left. - \sigma^2 (\text{grad } S \cdot \text{grad } S) + \frac{\sigma^2}{2} \nabla^2 R \right] \quad (42)$$

logo, integrando (42), temos

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{1}{\sigma^2 m} V + \frac{\sigma^2}{2} \nabla^2 R + \sigma^2 \left[(\text{grad } R)^2 - (\text{grad } S)^2 \right] + \alpha(t) \quad (43)$$

onde $\alpha(t)$ é a constante de integração arbitrária. $\square$

Agora, observemos que, multiplicando (43) pela unidade imaginária i e adicionando a (40) obtemos:

$$\frac{\partial R}{\partial t} + i \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\sigma^2}{2} \nabla^2 S - \sigma^2 \text{grad } R \cdot \text{grad } S \quad (44) \\ - \frac{i}{\sigma^2 m} V - i \frac{\sigma^2}{2} \left[(\text{grad } S)^2 - (\text{grad } R)^2 \right] + i \frac{\sigma^2}{2} \nabla^2 R$$

Multiplicando (44) membro a membro por $\exp(R+iS)$ resulta:

$$\exp(R+iS) \left[\frac{\partial R}{\partial t} + i \frac{\partial S}{\partial t} \right] = -\frac{i}{\sigma^2 m} \left[V \exp(R+iS) \right] \quad (45) \\ + i \frac{\sigma^2}{2} \left\{ \exp(R+iS) \left[(\text{grad } R)^2 - (\text{grad } S)^2 + \nabla^2 R + \nabla^2 S \right. \right. \\ \left. \left. + 2i \text{grad } R \cdot \text{grad } S \right] \right\}$$

Observemos que

$$\frac{\partial}{\partial t} \exp(R+iS) = \exp(R+iS) \left(\frac{\partial R}{\partial t} + i \frac{\partial S}{\partial t} \right) \quad (46)$$

Assim (45) se escreve como:

$$\frac{\partial}{\partial t} \exp(R+iS) = -\frac{i}{\sigma^2 m} \left[V \exp(R+iS) \right] + i \frac{\sigma^2}{2} \left\{ \exp(R+iS) \left[(\text{grad } R)^2 - \right. \right. \\ \left. \left. - (\text{grad } S)^2 + \nabla^2 R + i \nabla^2 S + 2i \text{grad } R \cdot \text{grad } S \right] \right\}$$

Mostremos agora que

$$i\frac{\sigma^2}{2} \nabla^2 \exp(R+iS) = i\frac{\sigma^2}{2} \{ \exp(R+iS) [(\text{grad } R)^2 - (\text{grad } S)^2 + \nabla^2 R + i\nabla^2 S + 2i \text{grad } R \cdot \text{grad } S] \}$$

Isto será feito tão somente para a componente x, com demonstração similar para as outras duas componentes.

$$\begin{aligned} \nabla_x^2 \exp(R+iS) &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\exp(R+iS)) = \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial}{\partial x} \exp(R+iS) \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left[\exp(R+iS) \cdot \left(\frac{\partial R}{\partial x} + i \frac{\partial S}{\partial x} \right) \right] \\ &= \exp(R+iS) \left[\frac{\partial^2 R}{\partial x^2} + i \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right] + \\ &+ \left(\frac{\partial R}{\partial x} + i \frac{\partial S}{\partial x} \right) \left[\exp(R+iS) \left(\frac{\partial R}{\partial x} + i \frac{\partial S}{\partial x} \right) \right] \\ &= \exp(R+iS) \left[\frac{\partial^2 R}{\partial x^2} + i \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right] + \exp(R+iS) \left\{ \left(\frac{\partial R}{\partial x} \right)^2 + \right. \\ &\quad \left. i \left(\frac{\partial R}{\partial x} \frac{\partial S}{\partial x} \right) + i \left(\frac{\partial S}{\partial x} \frac{\partial R}{\partial x} \right) - \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 \right\} \\ &= \exp(R+iS) \left[\nabla_x^2 R + i \nabla_x^2 S + (\nabla_x R)^2 + 2i \nabla_x R \nabla_x S \right. \\ &\quad \left. - (\nabla_x S)^2 \right] \end{aligned}$$

Assim

$$i\frac{\sigma^2}{2} \nabla_x^2 \exp(R+iS) = i\frac{\sigma^2}{2} \{ \exp(R+iS) \cdot \quad (47)$$

$$\cdot \left[\nabla_x^2 R + i \nabla_x^2 S + (\nabla_x R)^2 + 2i \nabla_x R \nabla_x S - (\nabla_x S)^2 \right]$$

$$\text{onde } \nabla_x = \frac{\partial}{\partial x} \text{ e } \nabla_x^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} .$$

Procedendo-se da mesma forma com as componentes y e z ,

obtemos

$$i \frac{\sigma^2}{2} \nabla^2 \exp(R+iS) = i \frac{\sigma^2}{2} \{ \exp(R+iS) \cdot [\nabla^2 R + i \nabla^2 S + (\nabla R)^2 + 2i \nabla R S - (\nabla S)^2] \} \quad (48)$$

Logo por (45), (46) e (48), temos

$$\frac{\partial}{\partial t} \exp(R+iS) = \frac{-i}{\sigma^2 m} [V \exp(R+iS)] + i \frac{\sigma^2}{2} \nabla^2 \exp(R+iS) \quad (49)$$

Definindo $\exp(R+iS) = \psi$ e $\sigma^2 = \frac{\hbar}{m}$ e substituindo em (49), fica

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} V \psi + i \frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \psi$$

Portanto

$$i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V \psi \quad (50)$$

a qual é a *Equação de Schrödinger*.

□

CAPÍTULO IV

RESUMO E OBSERVAÇÕES FINAIS

IV.A) INTRODUÇÃO:

Vamos resumir o resultado sobre a equivalência da equação de Schrödinger com um processo de Markov, demonstrado no último capítulo. Vamos indicar as generalizações deste resultado e também dar referências onde diversas críticas contra a Interpretação Estocástica da Mecânica Quântica são feitas.

IV.B) RESUMO DO CAPÍTULO III:

Primeiro vamos rever as identificações que foram feitas entre elementos da Mecânica Quântica e de Processos Estocásticos. Sempre podemos escrever ψ como

$$\psi(\vec{x}t) = \exp(R(\vec{x}t) + i(S(\vec{x}t))) \quad (1)$$

onde R e S são simplesmente as partes real e complexa da função complexa ψ da Mecânica Quântica. Identificamos

$$\rho(\vec{x}t) \equiv \exp(2R(\vec{x}t)) \quad (2)$$

e

$$\vec{v}(\vec{x}t) \equiv \frac{\hbar}{m} \text{grad } S(\vec{x}t) \quad (3)$$

onde $\rho(\vec{x}t)$ é a densidade de um processo estocástico e $\vec{v}(\vec{x}t)$ é a velocidade corrente associados com o processo. Também é suposto que a variância $\sigma^2(\vec{x}t)$ do processo estocástico é constante, isto é $\sigma^2(\vec{x}t) = \sigma^2 \equiv \frac{\hbar}{m}$, onde $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, h é a constante de Planck e m é a massa da partícula.

Agora seja S um sistema quântico cujo estado num instante

t_0 está descrito em Mecânica Quântica pela função de onda $\psi(\vec{x}, t_0)$. Então ficam determinadas $R(\vec{x}t_0)$ e $S(\vec{x}t_0)$ pela equação (1). Portanto sabemos

$$\rho(\vec{x}t_0) = \exp [2R(\vec{x}t_0)]$$

e

$$\vec{v}(\vec{x}t_0) = \frac{\hbar}{m} \nabla S(\vec{x}t_0)$$

por (2) e (3). Podemos também determinar a velocidade estocástica por uma equação de processo estocástico

$$\dot{\vec{u}}(\vec{x}t_0) = \sigma^2 \nabla R(\vec{x}t_0) \quad (4)$$

Agora usando $\rho(\vec{x}t_0)$, $\vec{v}(\vec{x}t_0)$ e $\vec{u}(\vec{x}t_0)$ como condições iniciais no sistema de equações do capítulo III, (33) e (20)

$$\begin{cases} \frac{\partial \vec{v}(\vec{x}t)}{\partial t} = \frac{\vec{F}}{m} - (\vec{v} \cdot \text{grad})\vec{v} + (\vec{u} \cdot \text{grad})\vec{u} + \frac{\sigma^2}{2} \nabla^2 \vec{u} \\ \frac{\partial \rho(\vec{x}t)}{\partial t} = -\text{div}(\rho \vec{v}) \end{cases} \quad (5)$$

Podemos determinar unicamente $\rho(\vec{x}t)$, $\vec{v}(\vec{x}t)$ e $\vec{u}(\vec{x}t)$, para todo t .

O sistema de equações (5) é deduzido das equações de Fokker-Planck que caracteriza qualquer processo de Markov, mais a equação dinâmica

$$\frac{1}{2} [DD_{\star} + D_{\star} D]X = \frac{F}{m} ,$$

F sendo a força externa sobre a partícula.

Usando $\psi(\vec{x}t_0)$ como uma condição inicial na equação de Schrödinger, $\psi(\vec{x}t)$ é determinada unicamente para qualquer t .

Nós mostramos no capítulo III que o sistema de Equações (5) é equivalente a Equação de Schrödinger, o que quer dizer que $\psi(x,t)$ obtida como uma solução da Equação de Schrödinger satisfaz $\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2$, onde $\rho(x,t)$ é obtida como solução do sistema (5). Em outras palavras, estamos livres para trabalhar com a Equação de Schrödinger ou com o sistema (5). Trabalhando com o sistema (5) é válido, conceitualizar sobre trajetória de partículas.

IV.C) GENERALIZAÇÕES:

Até agora nós temos discutido o caso do observável posição de uma partícula não relativística em um campo potencial. Isto é, com a seguinte equação de Schrödinger

$$\frac{\partial \psi(\vec{x},t)}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{x},t) + \frac{i}{\hbar} V \psi(\vec{x},t)$$

Existe as seguintes generalizações:

Foi mostrado em [6] que o caso do observável posição já inclui os casos para qualquer observável.

Nelson [13] tratou o caso de uma partícula em um campo eletromagnético. Mostrou que este caso pode também ser tratado como um processo estocástico. A demonstração é quase igual à feita no capítulo III.

O caso de uma partícula relativística foi tratado por De La Peña, o qual tem também uma série de artigos sobre Mecânica Quântica Estocástica. O livro de M. Jammer tem a maioria destas referências.

IV.D) CRÍTICAS:

A conclusão no artigo "Review" do Ghirardi [6] é que a Mecânica Quântica Estocástica resolve alguns problemas da Mecânica Quântica, mas não resolve as dificuldades básicas. (Há também uma série de críticas desta interpretação dadas nas referências [7, 9, 11, 15].) A Mecânica Quântica resolve o problema das trajetórias; isto é, dentro do ponto de vista e estrutura matemática é válido conceitualizar sobre um caminho bem definido de uma partícula. Mas Ghirardi concluiu que existe uma série de outros problemas associados com linearidade, localidade e distinção entre estados puros e mistos que a Mecânica Quântica Estocástica, pelo menos até o presente, não resolve. Nós não temos condições de discutir estes pontos neste trabalho. Porém, julgo interessante mencionar que foi apresentado uma interpretação não-ergótica da Mecânica Quântica [1], onde se pode falar de uma interpretação não-ergótica estocástica da Mecânica Quântica, na qual as críticas citadas acima não são necessariamente válidas.

REFERÊNCIAS

- [1] BUONOMANO, V.: *Quantum Mechanics as a Nonergodic Classical Statistical Theory*. Il Nuovo Cimento, 57 B, (1): 146-70, 1980.
- [2] COHEN, T.: *Quantum Mechanics*. Transl. by Susan Reid Hemley, New York, Willey, C 1977.
- [3] COX, D.R. & MILLER, H.O.: *The Theory of Stochastic Processes*. London, Chapman-Hall, 1965, 308 p.
- [4] EINSTEIN, A.: *Investigations on the Theory of Brownian Movement*. London, Dover
- [5] FELLER, W.: *Introduction to Probability Theory and its Applications*. New York, Willey, 1957, V. 1.
- [6] GHIRARDI, G.C. et alii: *The Stochastic Interpretation of Quantum Mechanics: A Critical Review*. Revista Del Nuovo Cimento, 1, 3: 1978, 33 p.
- [7] GILSON, J.G.: *On Stochastic Theories of Quantum Mechanics*. Proc. Camb. Phil. Soc. 64: 1061-70, 1968.
- [8] GNEDENKO, B.V.: *The Theory of Probability*. 2 ed. Moscou, Mir/1973/.
- [9] GRABERT, H.; HANGGI, P. & TALKNER, P.: *Is Quantum Mechanics Equivalent to a Classical Stochastic Processes?* Physical Review A, 19 (6): 2440-4, jun. 1979.
- [10] JAMMER, M.: *The Philosophy of Quantum Mechanics*. New York, Wiley, 1974.
- [11] KRACKLAUER, A.F.: *Comment on Derivation of the Schrödinger Equation from Newtonian Mechanics*. Physical Review, 10 (4): 1358-60, ang. 1974.

- [12] MESSIAH, A.: *Quantum Mechanics*. New York, North-Holland, 1970, v. 1.
- [13] NELSON, E.: *Derivation of the Schrödinger Equation from Newtonian Mechanics*. Phys. Rev. 150 (4): 1079-85 p.
- [14] NELSON, E.: *Dynamical Theories of Brownian Motion*. Princeton, Princeton Univ., 1972.
- [15] ONOFRI, E.: *Some Considerations about Nelson's derivation of Schrödinger Equation*. In: Janner. A. Group. *Theoretical Methods in Physics*. Berlin, Springer, 1976. 627 p. (Lecture Notes on Physics, 50).
- [16] VON NEUMANN, J.: *The Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*. Princeton, Princeton Univ.