



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ**  
**CENTRO DE CIÊNCIAS**  
**DEPARTAMENTO DE FÍSICA**  
**CURSO DE GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

**ÍTALO ALBUQUERQUE DA SILVA**

**INFERÊNCIA DE DRIFT E DIFUSÃO EM SISTEMAS ESTOCÁSTICOS VIA  
DINÂMICA DE LANGEVIN**

**FORTALEZA**

**2025**

ÍTALO ALBUQUERQUE DA SILVA

INFERÊNCIA DE DRIFT E DIFUSÃO EM SISTEMAS ESTOCÁSTICOS VIA  
DINÂMICA DE LANGEVIN

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado  
ao Curso de Graduação em Física do Centro  
de ciências da Universidade Federal do Ceará,  
como requisito parcial à obtenção do grau de  
bacharel em Física.

Orientador: Prof. Dr. Saulo Davi So-  
ares e Reis.

FORTALEZA

2025

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação  
Universidade Federal do Ceará  
Sistema de Bibliotecas  
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

---

- S584i Silva, Ítalo Albuquerque da.  
Inferência de Drift e Difusão em Sistemas Estocásticos via Dinâmica de Langevin / Ítalo Albuquerque da Silva. – 2025.  
58 f. : il. color.
- Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Curso de Física, Fortaleza, 2025.  
Orientação: Prof. Dr. Saulo Davi Soares e Reis.
1. Dinâmica estocástica. 2. Sistemas dinâmicos. 3. Análise de dados. 4. Algoritmo de inferência. I.  
Título.

CDD 530

---

ÍTALO ALBUQUERQUE DA SILVA

INFERÊNCIA DE DRIFT E DIFUSÃO EM SISTEMAS ESTOCÁSTICOS VIA  
DINÂMICA DE LANGEVIN

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado  
ao Curso de Graduação em Física do Centro  
de ciências da Universidade Federal do Ceará,  
como requisito parcial à obtenção do grau de  
bacharel em Física.

Aprovada em: 18/07/2025.

BANCA EXAMINADORA

---

Prof. Dr. Saulo Davi Soares e Reis (Orientador)  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof. Dr. César Ivan Nunes Sampaio Filho  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Me. Rafael de Lima Peixoto  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

À minha querida vó Margarida Sousa da Silva  
(In memoriam)

## AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus pais, Francisco Iran Sousa da Silva e Maria Vilani Coelho de Albuquerque, por todo suporte e motivação nessa jornada que foi a graduação, cada conselho, cada conversa e orientação me ajudou a chegar até aqui e a ser quem sou, sem eles nada disso seria possível.

À minha avó Margarida Sousa da Silva, por cuidar de mim quando eu era criança, por sempre ficar mais feliz pelas minhas conquistas do que eu, fazendo com que todo mundo soubesse até se eu ganhasse um campeonato de bila. Por nunca ter deixado faltar amor e alegria a cada domingo de churrasco e feijoada em família. Infelizmente ela não está mais aqui, mas cada momento de dedicação da minha vida em qualquer aspecto, faço pensando nela, e parte desse momento também é sobre ela.

Ao meu irmão, Bruno Alves Sousa da Silva, que mesmo não estando sob o mesmo teto que eu no período da graduação, me forneceu afeto e acolhimento em diversos momentos que precisei. Bem como minha irmã, Sheila Alves Sousa da Silva, que mesmo sem estar inserida no meu contexto acadêmico, me ofereceu o que um ser humano mais precisa, amor e atenção.

À minha querida e amada namorada, Ana Karoline Figueiredo Silva, que desde meu primeiro dia na graduação esteve ao meu lado, me ouvindo, conversando comigo, me acolhendo, me incentivando, me abraçando quando preciso, estando nos meus momentos de lazer, e sendo minha parceira em todos os sentidos que a vida pode ter, ela é uma parte essencial nessa minha caminhada, não só na minha graduação, na minha vida inteira.

Aos meus queridos amigos mais próximos que tive durante minha jornada acadêmica. Ao meu amigo Vitor Belo, por ser meu parceiro de futebol, de conversas sérias quando foram necessárias, de brincadeiras que foram parte crucial para deixar tudo mais leve. À minha amiga Sofia Veras, por ser a parceira várias vezes das minhas longas viagens de ônibus indo e voltando da UFC, bem como de conversas e desabafos importantes. À minha amiga Maria Fernanda, que sempre foi parceira de diversão, bem como das conversas sobre cinema e sobre tudo que existe nesse mundo, se fazendo uma verdadeira amiga que posso contar para sempre.

Ao meu amigo, Nicolas Eduardo, dessa lista seleta o único que não faz parte da física, mas que desde meu ensino médio continuou sendo um grande amigo que a vida me deu. À minha amiga Elcy Gabrielle, que durante muito tempo foi uma pessoa que tive

das mais profundas conversas até os momentos mais descontraídos, se fazendo assim, mais uma pessoa importantíssima em tudo que rege minha vida nesses últimos 4 anos.

Aos meus amigos e colegas que fiz durante a graduação, outros de mais tempo, que mesmo não estando diariamente comigo, foram super importantes na minha vida durante esse período: Willian Silveira, Marina de Almeida, Victor Silvestre, Diogo de Oliveira, Jéssica Haner, João Augusto, Hanna Alves, e tantos outros.

Ao professor Saulo Davi Soares e Reis, por, desde o início das minhas atividades como bolsista, ter sido um excelente orientador, sempre presente, sempre compreendendo cada momento da minha graduação, bem como tendo sido parte da minha motivação para seguir no curso, seja me orientando, ou lecionando.

À Universidade Federal do Ceará, pela bolsa de Iniciação Científica (PIBIC) e por ter me proporcionado viver tudo isso descrito acima.

”Minha única crítica esclarece a má  
consciência intelectual que se sente através  
das linhas.” (Albert Einstein)



## RESUMO

Neste trabalho apresentamos um desenvolvimento detalhado acerca da inferência de termos de uma equação de movimento a partir de dados reais, concentrando os esforços especialmente na teoria moderna do movimento Browniano, que parte da equação de Langevin, que descreve a dinâmica estocástica de um sistema. Foram aplicados métodos de simulação numérica a fim de se obter uma melhor previsão acerca do comportamento de alguns sistemas dinâmicos, em especial sistemas que partem da equação de Langevin para descrever o movimento de uma partícula submetida a um potencial. Bem como foi feito um estudo acerca de equações diferenciais como um todo. Obtivemos resultados para diferentes trajetórias simuladas, os quais pudemos descrever e inferir os termos desejados para cada sistema de maneira bastante satisfatória. Bem como foi possível realizar a observação de uma partícula em três dimensões, nos aproximando de um estudo detalhado sobre o comportamento real de um sistema complexo. A análise de dados para geração das simulações de cada configuração deste trabalho, bem como o desenvolvimento do algoritmo de inferência, foram partes cruciais no andamento da pesquisa e na geração dos resultados.

**Palavras-chave:** dinâmica estocástica; sistemas dinâmicos; análise de dados; algoritmo de inferência.

## ABSTRACT

In this paper we present a detailed development of the inference of terms of an equation of motion from real data, focusing especially on the modern theory of Brownian motion, which starts from the Langevin equation, which describes the stochastic dynamics of a system. Numerical simulation methods were applied in order to obtain a better prediction of the behavior of some dynamic systems, especially systems that use the Langevin equation to describe the movement of a particle subjected to a potential. We also studied differential equations as a whole. We obtained results for different simulated trajectories, which we were able to describe and infer the desired terms for each system quite satisfactorily. We were also able to observe a particle in three dimensions, bringing us closer to a detailed study of the real behavior of a complex system. The analysis of the data used to generate the simulations for each configuration in this work, as well as the development of the inference algorithm, were crucial to the progress of the research and the generation of the results.

**Keywords:** stochastic dynamics; dynamic systems; data analysis; inference algorithm.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Sistema dinâmico não linear que descreve a exploração sustentável de recursos renováveis, como estoques pesqueiros. Desenvolvido nos anos 1950 pelos economistas H. Scott Gordon e M. B. Schaefer, ele integra biologia populacional e economia para determinar níveis ótimos de exploração. . . . .	16
Figura 2 – Modelo econômico proposto em 1970 para explicar a migração rural-urbana em países em desenvolvimento. . . . .	17
Figura 3 – Representação esquemática do movimento Browniano. . . . .	18
Figura 4 – Gráfico da distribuição de Maxwell-Boltzmann para o oxigênio submetido a três temperaturas distintas. . . . .	20
Figura 5 – Exemplo de duas trajetórias simbolizando o processo de Wiener. O código escalona os incrementos para que tenham variância $dt$ , e soma o cumulativo dos incrementos para gerar cada trajetória, como exige o processo de Wiener. . . . .	24
Figura 6 – Histograma com o domínio contínuo do problema dividido em “caixas” a fim de discretizar os dados de trajetória para melhor visualização do movimento da partícula. . . . .	36
Figura 7 – Visualização gráfica de uma trajetória escolhida aleatoriamente para análise do comportamento da partícula no decorrer do tempo. . . . .	37
Figura 8 – Coeficientes de drift (à direita) e difusão (à esquerda) inferidos para $\tau = 1$ , utilizando a expansão de Kramers-Moyal. A curva pontilhada representa os valores teóricos utilizados na geração das trajetórias. O drift estimado apresenta excelente concordância com o modelo teórico, mesmo em regiões próximas às bordas. Por outro lado, o coeficiente de difusão mostra oscilações mais visíveis, principalmente fora do centro, onde há menor densidade de dados. Tais flutuações refletem a maior sensibilidade estatística da inferência da difusão, dependente de momentos quadráticos e de boa cobertura amostral. . . . .	38

- Figura 9 – Coeficientes de drift (à direita) e difusão (à esquerda) inferidos via método de Kramers-Moyal para diferentes valores de  $\tau$ . Observa-se que o drift estimado (direita) se mantém próximo ao valor teórico para diferentes  $\tau$ , evidenciando robustez da inferência quanto a esse termo determinístico. Em contraste, o coeficiente de difusão (esquerda) apresenta sensível dependência com o valor de  $\tau$ , especialmente nas bordas do domínio. Isso ocorre devido à acumulação de ruído e à perda de resolução temporal com  $\tau$  maiores, o que afeta mais significativamente a estimativa de variâncias (segunda ordem) do que médias (primeira ordem). . . . . 38
- Figura 10 – Mapa de calor da ocupação espacial da partícula no plano  $xy$  (imagem da esquerda) e no plano  $yz$  (imagem da direita) para uma única trajetória simulada. A escala de cores indica o número de visitas em cada região, as linhas tracejadas representam contornos do potencial, evidenciando os mínimos onde a partícula tende a permanecer e as transições ocasionais entre poços. . . . . 40
- Figura 11 – Histograma comparativo entre o modelo de simulação (via equação de Langevin) e o modelo teórico (equação de Fokker-Planck), com o domínio contínuo do problema dividido em "caixas" a fim de discretizar os dados de trajetória para melhor visualização do movimento da partícula. 41
- Figura 12 – Trajetória temporal de uma única partícula em cada componente espacial. Nota-se que, enquanto em  $z$  a partícula realiza transições entre os dois mínimos do potencial, em  $x$  e  $y$  ela permanece confinada em um mesmo poço durante o intervalo observado. . . . . 41
- Figura 13 – Trajetória tridimensional de uma única partícula simulada no sistema estudado, com destaque para os pontos inicial (verde) e final (vermelho). Observa-se que a partícula percorre diferentes regiões do espaço de fases, realizando sucessivas transições entre os mínimos do potencial duplo. Essas transições são impulsionadas pela interação entre o drift determinístico, derivado do potencial, e o ruído estocástico representado pelo termo difusivo. A visualização evidencia o caráter aleatório e não retilíneo do movimento, típico de processos estocásticos. . . . . 42

- Figura 14 – Inferência dos momentos de Kramers–Moyal para a componente  $X$  com passo temporal  $\tau = 1$  (correspondente a  $0,1\text{ ms}$  de tempo físico). No painel esquerdo, comparamos o drift estimado (linha tracejada azul) com a forma analítica  $A_{\text{teórico}}(x) = (\alpha - \gamma)x - \beta x^3$  (linha contínua vermelha). No painel direito, mostramos a difusão local inferida (linha tracejada verde) em relação ao valor constante  $D = 1$  utilizado na simulação (linha contínua vermelha). . . . . 44
- Figura 15 – Comparação entre os coeficientes de drift (à esquerda) e difusão (à direita) inferidos numericamente ao longo da coordenada  $y$ , utilizando o método de Kramers-Moyal com  $\tau = 1$  (correspondente a  $0,1\text{ ms}$  de tempo físico). As curvas teóricas estão indicadas em vermelho, enquanto as estimativas numéricas aparecem tracejadas. . . . . 44
- Figura 16 – Comparação entre os coeficientes de drift (à esquerda) e difusão (à direita) ao longo de  $z$ , obtidos via inferência de Kramers-Moyal com  $\tau = 1$  ( $0,1\text{ ms}$  em tempo físico). A curva teórica é exibida em vermelho e a estimativa numérica em azul (drift) ou verde (difusão). . . . . 45
- Figura 17 – Comparação entre os coeficientes de drift (à esquerda) e difusão (à direita) ao longo de  $x$ , obtidos via inferência de Kramers-Moyal com  $\tau = 5$  ( $0,5\text{ ms}$  em tempo físico). . . . . 45
- Figura 18 – Comparação entre os coeficientes de drift (à esquerda) e difusão (à direita) ao longo de  $y$ , obtidos via inferência de Kramers-Moyal com  $\tau = 5$  ( $0,5\text{ ms}$  em tempo físico). . . . . 46
- Figura 19 – Comparação entre os coeficientes de drift (à esquerda) e difusão (à direita) ao longo de  $z$ , obtidos via inferência de Kramers-Moyal com  $\tau = 5$  ( $0,5\text{ ms}$  em tempo físico). . . . . 46
- Figura 20 – Comparação entre os coeficientes de drift (à esquerda) e difusão (à direita) ao longo de  $x$ , obtidos via inferência de Kramers-Moyal com  $\tau = 10$  ( $1\text{ ms}$  em tempo físico). . . . . 46
- Figura 21 – Comparação entre os coeficientes de drift (à esquerda) e difusão (à direita) ao longo de  $y$ , obtidos via inferência de Kramers-Moyal com  $\tau = 10$  ( $1\text{ ms}$  em tempo físico). . . . . 47

Figura 22 – Comparação entre os coeficientes de drift (à esquerda) e difusão (à direita) ao longo de $z$ , obtidos via inferência de Kramers-Moyal com $\tau = 10$ (1 ms em tempo físico). . . . .	47
Figura 23 – Comparação entre os coeficientes de drift (à esquerda) e difusão (à direita) ao longo de $x$ , obtidos via inferência de Kramers-Moyal com $\tau = 50$ (5 ms em tempo físico). . . . .	47
Figura 24 – Comparação entre os coeficientes de drift (à esquerda) e difusão (à direita) ao longo de $y$ , obtidos via inferência de Kramers-Moyal com $\tau = 50$ (5 ms em tempo físico). . . . .	48
Figura 25 – Comparação entre os coeficientes de drift (à esquerda) e difusão (à direita) ao longo de $z$ , obtidos via inferência de Kramers-Moyal com $\tau = 50$ (5 ms em tempo físico). . . . .	48
Figura 26 – Comparação entre os coeficientes de drift (à esquerda) e difusão (à direita) ao longo de $x$ , obtidos via inferência de Kramers-Moyal com $\tau = 100$ (10 ms em tempo físico). . . . .	48
Figura 27 – Comparação entre os coeficientes de drift (à esquerda) e difusão (à direita) ao longo de $x$ , obtidos via inferência de Kramers-Moyal com $\tau = 100$ (10 ms em tempo físico). . . . .	49
Figura 28 – Comparação entre os coeficientes de drift (à esquerda) e difusão (à direita) ao longo de $x$ , obtidos via inferência de Kramers-Moyal com $\tau = 100$ (10 ms em tempo físico). . . . .	49
Figura 29 – Parâmetros de simulação e definição do potencial tridimensional utilizados para gerar trajetórias de partículas em um sistema estocástico. Inclui a definição dos limites espaciais, constantes físicas, e a formulação matemática do potencial e da força associada. . . . .	55
Figura 30 – Implementação do algoritmo de Euler-Maruyama para a simulação de trajetórias estocásticas de partículas. O código define as condições iniciais, gera o ruído térmico e atualiza a posição das partículas ao longo do tempo. . . . .	55

Figura 31 – Implementação da função de inferência baseada em regressão esparsa com atraso temporal $\tau$ para estimativa do drift e da difusão. Utiliza o modelo SINDy com biblioteca polinomial para identificar as equações dinâmicas a partir das trajetórias simuladas. . . . .	56
Figura 32 – Implementação do método de Kramers–Moyal para estimar localmente os coeficientes de difusão e drift a partir dos deslocamentos de partículas agrupadas em bins espaciais. A função calcula médias e variâncias dos deslocamentos com atraso temporal fixo $\tau$ . . . . .	57
Figura 33 – Geração de gráficos comparando os resultados inferidos de drift e difusão com os valores teóricos ao longo das três dimensões espaciais (x, y, z), para diferentes valores de $\tau$ . . . . .	58

## LISTA DE SÍMBOLOS

$f_{MB}(v)$  Distribuição de Maxwell-Boltzmann.

$k_B$  Constante de Boltzmann.

$\lambda_x$  Desvio quadrático médio da posição.

$D$  Coeficiente de Difusão.

$W$  Processo de Wiener

$\Delta W$  Incremento de tempo no Processo de Wiener.

$F_a(t)$  Força estocástica.

$a(r)$  Termo de Drift.

$B_t^{(\omega)}$  Movimento Browniano com a notação de Itô.

$P(x,t)$  Densidade de probabilidade.

$\Delta t$  Passo de tempo para simulação numérica.

$\Delta t_{out}$  Passo de tempo para cada trajetória salva.

$\tau$  Atraso (“lag”) temporal.



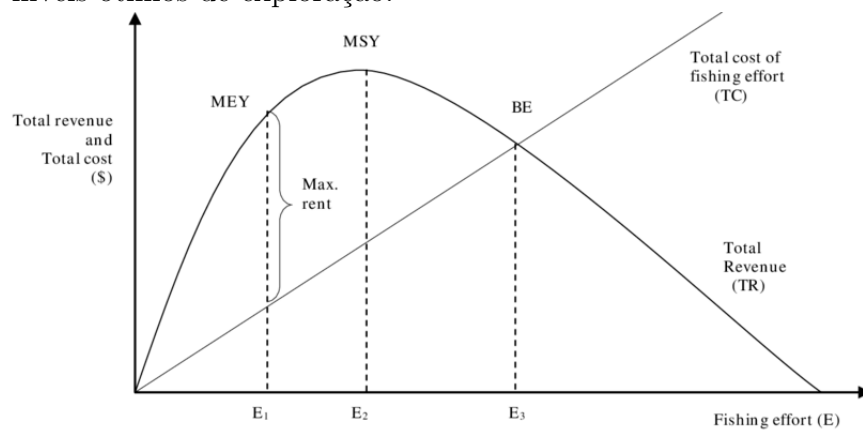
## SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO . . . . .	16
2	DINÂMICA ESTOCÁSTICA . . . . .	22
2.1	Processos Markovianos . . . . .	23
2.2	Processo de Wiener . . . . .	24
2.3	Processo de Itô . . . . .	25
2.4	Equação de Langevin . . . . .	26
2.5	Equação de Fokker-Planck . . . . .	28
3	METODOLOGIA . . . . .	30
3.1	Simulação das Trajetórias . . . . .	30
3.2	Operador Adjunto de Fokker-Planck . . . . .	31
3.3	Construção de Índice Espacial para Inferência . . . . .	31
3.4	Inferência de Parâmetros . . . . .	32
3.5	Método de Euler-Maruyama . . . . .	34
3.5.1	<i>Integração Numérica com Euler-Maruyama</i> . . . . .	35
4	RESULTADOS . . . . .	36
4.1	Análise de Trajetórias em Três Dimensões . . . . .	40
4.1.1	<i>Comportamento com <math>\tau</math> Pequeno</i> . . . . .	49
4.1.2	<i>Comportamento com <math>\tau</math> Grande</i> . . . . .	50
5	CONCLUSÕES SOBRE O TRABALHO . . . . .	51
	REFERÊNCIAS . . . . .	52
	APÊNDICE A –ALGORITMO UTILIZADO . . . . .	55

## 1 INTRODUÇÃO

Sistemas dinâmicos são sistemas que descrevem como alguma variável de interesse de estudo evolui com o tempo, sob ação de uma força determinística ou aleatória. Quando esse sistema possui um comportamento difícil de ser descrito analiticamente, como na maioria dos sistemas reais, dizemos que é um sistema dinâmico não linear, como o modelo de Gordon-Schaefer (Gordon, 1954) (Schaefer, 1957), o modelo de Harris-Todaro (Harris; Todaro, 1970), e mais voltado para a física, o Movimento Browniano, que o presente trabalho irá se aprofundar mais.

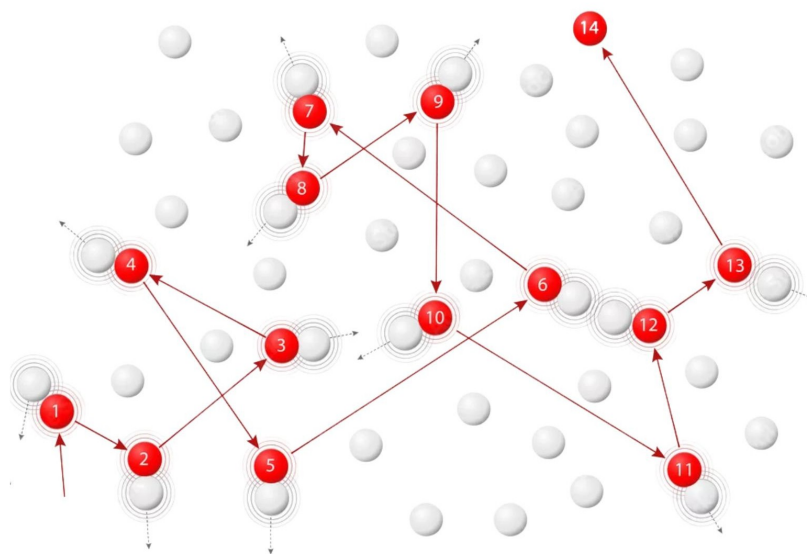
Figura 1 – Sistema dinâmico não linear que descreve a exploração sustentável de recursos renováveis, como estoques pesqueiros. Desenvolvido nos anos 1950 pelos economistas H. Scott Gordon e M. B. Schaefer, ele integra biologia populacional e economia para determinar níveis ótimos de exploração.



Fonte: *The nature and magnitude of global non-fuel fisheries subsidies* (Khan, 2006).



Figura 3 – Representação esquemática do movimento Browniano.



Fonte: Nayturr. Disponível em: <https://nayturr.com/types-of-active-transport/>. Acesso em: 28/05/2025

Na figura 3, as moléculas do fluido estão representadas pelas bolinhas brancas, e a bolinha vermelha representa uma partícula suspensa no fluido, as setas apontam a direção que a partícula está indo.

Nos anos seguintes, foram realizados diversos experimentos com a finalidade de estudar o movimento Browniano, e algumas explicações pouco fundamentadas foram fornecidas para a aleatoriedade do movimento. Concomitante a isso, os estudos sobre átomos e moléculas eram propostos com o desenvolvimento da teoria cinética dos gases.

A teoria cinética dos gases faz parte de um ramo da termodinâmica que aprofunda os fenômenos microscópicos da matéria. Em 1738, o matemático e físico suíço, Daniel Bernoulli, estabeleceu que os gases consistem em um grande número de moléculas se movendo em todas as direções, onde elas colidem entre si (Bernoulli, 1738), essa e outras constatações sobre o que acontecia microscopicamente em um gás, serviram como base para o desenvolvimento da teoria cinética dos gases, que, apesar de não ser bem aceita quando Bernoulli divulga suas ideias, passa a ganhar a força a partir do século seguinte.

Em 1857, Rudolf Clausius dá sua contribuição à teoria cinética molecular, já considerando os trabalhos de Bernoulli, Clausius escreve seu livro *“Ueber die Art der*

*Bewegung, welche wir Wärme nemmen*” (Clausius, 1857), onde descreve e introduz um modelo de moléculas com rotação, vibração e translação. E é a partir daí que ele define que a conservação da energia cinética translacional em colisões não poderia ser garantida, pois elas poderiam provocar a conversão de um tipo de movimento em outro.

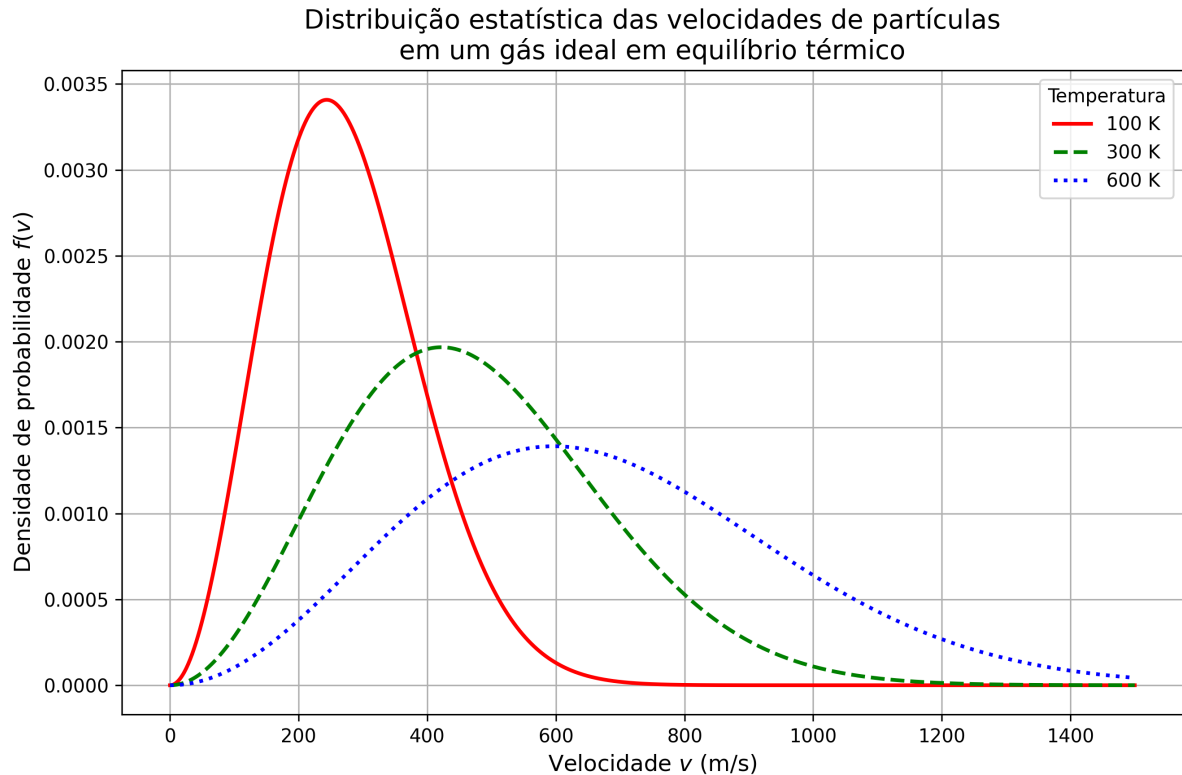
Clausius concluiu que a hipótese de uma velocidade constante e igual para todas as moléculas era inviável. Considerando que a velocidade translacional poderia variar entre as moléculas, ele apresentou uma explicação para o fenômeno da evaporação. Como apenas as moléculas com velocidade acima da média possuem energia cinética suficiente para superar as forças atrativas do líquido, ocorre uma perda de energia e, conseqüentemente, uma redução na temperatura da fase líquida.

Outras formulações, cada vez mais sofisticadas, acerca da teoria cinética dos gases, foram surgindo no decorrer do tempo, James Clerk Maxwell, a partir dos trabalhos de Clausius, desenvolveu a chamada distribuição de Maxwell (Maxwell, 1867), que posteriormente teve contribuição essencial de Ludwig Edward Boltzmann, estabelecendo o que conhecemos como distribuição de Maxwell-Boltzmann, que descreve a distribuição estatística das velocidades de partículas em um gás ideal em equilíbrio térmico que é da forma:

$$f_{MB}(v) = 4\pi \left( \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} \right)^3 v^2 e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}} \quad (1.1)$$

onde  $m$  representa a massa de uma partícula do gás,  $k_B$  é a constante de Boltzmann,  $T$  é a temperatura absoluta do gás, em Kelvin,  $v^2$  representa o elemento de volume em coordenadas esféricas para velocidades. Em três dimensões, o número de partículas com velocidade entre  $v$  e  $v + dv$  é proporcional à área da casca esférica, que é  $4\pi v^2 dv$ . Esse termo faz a distribuição crescer inicialmente com  $v$ , mas depois decair devido ao termo exponencial, como mostra a figura 2.

Figura 4 – Gráfico da distribuição de Maxwell-Boltzmann para o oxigênio submetido a três temperaturas distintas.



Fonte: Próprio autor.

Com a teoria cinética dos gases sendo uma área já em ascendência, são retomados os estudos envolvendo a teoria e o movimento browniano. E em 1905, com a descrição detalhada do movimento Browniano pelo físico Albert Einstein, átomos e moléculas foram aceitos como constituintes da matéria, e o movimento Browniano teve sua primeira explicação amplamente aceita (Salinas, 1999).

A explicação de Einstein sustentava que o movimento que Brown havia observado, era, na verdade, o movimento de moléculas de água “transportando” as partículas de pólen, utilizando argumentos que consistiam na flutuação dos átomos (Blundell; Blundell, 2010). Após o trabalho publicado de Einstein, algumas tentativas de generalizar a explicação do físico se destacaram, como por exemplo, a abordagem do físico francês Paul Langevin em (Langevin *et al.*, 1908).

Langevin propõe uma visão que simplifica e generaliza o trabalho de Einstein. Ele propôs um conceito até então não utilizado por Einstein de uma “força aleatória”, observou a presença de uma força de atrito viscoso, que era a resistência hidrodinâmica do fluido ao movimento da partícula, e introduziu uma equação diferencial estocástica

para explicar o fenômeno. Enquanto Einstein utilizou uma abordagem mais focada na densidade de probabilidade da posição da partícula ao longo do tempo, Langevin focou na trajetória instantânea da partícula para desenvolver sua equação para o movimento.

A partir da equação de Langevin, podemos classificar essas duas forças, e, a partir daí desenvolver o objetivo do presente trabalho, estudar sistemas dinâmicos não lineares e inferir equações de movimento a partir de dados, para o caso deste trabalho, gerados através de simulação computacional.

É de extrema importância, antes de destrinchar a solução da equação de Langevin e posteriormente a de Fokker-Planck, desenvolvida em (Fokker, 1914) e (Planck, 1917), que seja feito um estudo do potencial adotado, bem como a comparação com outros tipos de potenciais, neste trabalho teremos uma abordagem com o potencial duplo, já que se trata de um sistema composto por dois estados metaestáveis que são separados por uma barreira de potencial.

Sendo assim, o capítulo 2 do presente trabalho, se volta à explicação do que é a dinâmica estocástica e como são seus processos, com foco nos processos que foram considerados os mais importantes para o desenvolvimento da pesquisa, como o Processo de Wiener e o Processo de Itô. Já no capítulo 3, é descrita a metodologia utilizada para a posterior apresentação dos resultados, detalhando cada método realizado para geração de trajetórias e simulações numéricas. O capítulo 4 mostra os resultados obtidos e discute cada um deles com base no que se esperava com a literatura utilizada e com o que foi produzido de novo. Por fim, o capítulo de conclusão faz as considerações finais com tudo que foi estudado neste trabalho.

## 2 DINÂMICA ESTOCÁSTICA

O estudo relacionado à distribuição de probabilidades em um sistema de várias partículas interagindo entre si, configura o estudo de um sistema dinâmico estocástico. Um processo estocástico pode ser definido como um conjunto de variáveis aleatórias indexadas a uma variável, que costuma ser o tempo (Alves; Delgado, 1997). Esses processos podem ser classificados quanto à natureza temporal: em tempo discreto, as variáveis mudam apenas em instantes específicos (como etapas sequenciais), enquanto em tempo contínuo, as flutuações ocorrem a qualquer momento, refletindo uma dinâmica ininterrupta.

Em um processo estocástico, a equação que descreve a evolução temporal do sistema é chamada de equação mestra. A partir dela, é possível caracterizar propriedades estatísticas fundamentais, como média e variância. Quando essas propriedades permanecem constantes ao longo do tempo, o processo é classificado como estacionário. Caso contrário, se a média ou variância divergem (por exemplo, crescendo indefinidamente), trata-se de um processo não estacionário (Atuncar, 2011).

Para alguns sistemas complexos, é possível, a partir de dados reais, chegar até sua equação de movimento, tornando assim uma descrição mais precisa do sistema, por muitas vezes isso se dá partindo de alguns parâmetros definidos por equações que governam o sistema dinâmico.

Albert Einstein, no ano de 1905, em seu “ano miraculoso”, publicou o famoso artigo “*On the motion of small particles suspended in liquids at rest required by the molecular-kinetic theory of heat*” (Einstein *et al.*, 1905), Einstein conseguiu derivar previsões experimentalmente verificáveis sobre as taxas de difusão de partículas brownianas. Em seu trabalho, Einstein explorou o movimento Browniano partindo de probabilidades de transição entre estados, ele derivou uma equação diferencial parcial (a equação da difusão), descrevendo a densidade de probabilidade da posição de partículas em suspensão. Resolveu-a para demonstrar que o desvio quadrático médio da posição,  $\lambda_x = \sqrt{2Dt}$ , depende do coeficiente de difusão  $D$ , que representa o nível de “aleatoriedade” na trajetória da partícula e incorpora parâmetros termodinâmicos e geométricos do sistema, como viscosidade e raio das partículas.

Matematicamente, um processo estocástico é formalizado pela distribuição de probabilidade associada à evolução da variável de interesse em múltiplos instantes  $(t_1, t_2, t_3)$ . Essa estrutura permite calcular, por exemplo, a probabilidade de a trajetória de uma



partícula browniana estar contida em uma faixa específica de valores em diferentes intervalos de tempo, consolidando a ligação entre modelagem teórica e fenômenos observáveis.

## 2.1 Processos Markovianos

Um processo Markoviano pode ser caracterizado como uma classe de processo estocástico, que pode ser definido como sendo a probabilidade de um evento ocorrer baseado apenas no evento que o antecede. Tendo uma variável estocástica, ou seja, uma variável aleatória que depende do tempo, discretizada, com o tempo também discretizado, poderemos desenvolver com facilidade os artifícios matemáticos para descrever as cadeias de Markov.

Supondo que uma variável estocástica  $x_t$  assuma valores inteiros e  $t = 0, 1, 2, 3, \dots$ . Um processo estocástico fica completamente definido até o instante  $\ell$  pela distribuição de probabilidade

$$P_\ell(n_0, n_1, n_2, \dots, n_\ell) \quad (2.4)$$

de  $x_t$  tomar o valor  $n_0$  no instante  $t = 0$ , o valor  $n_1$  no instante  $t = 1$ , o valor  $n_2$  no instante  $t = 2, \dots$ , e o valor  $n_\ell$  no instante  $t = \ell$  (Tomé, 2001).

Em seguida, considerando a probabilidade condicional

$$P_{\ell+1}(n_{\ell+1} | n_0, n_1, n_2, \dots, n_\ell) \quad (2.5)$$

de  $x_t$  tomar o valor  $n_{\ell+1}$  no instante  $t = \ell + 1$ , dado que ela tenha tomado o valor  $n_0$  no instante  $t = 0$ , o valor  $n_1$  no instante  $t = 1$ , o valor  $n_2$  no instante  $t = 2, \dots$ , e o valor  $n_\ell$  no instante  $t = \ell$ . Se ela for igual à probabilidade condicional

$$P_{\ell+1}(n_{\ell+1} | n_\ell), \quad (2.6)$$

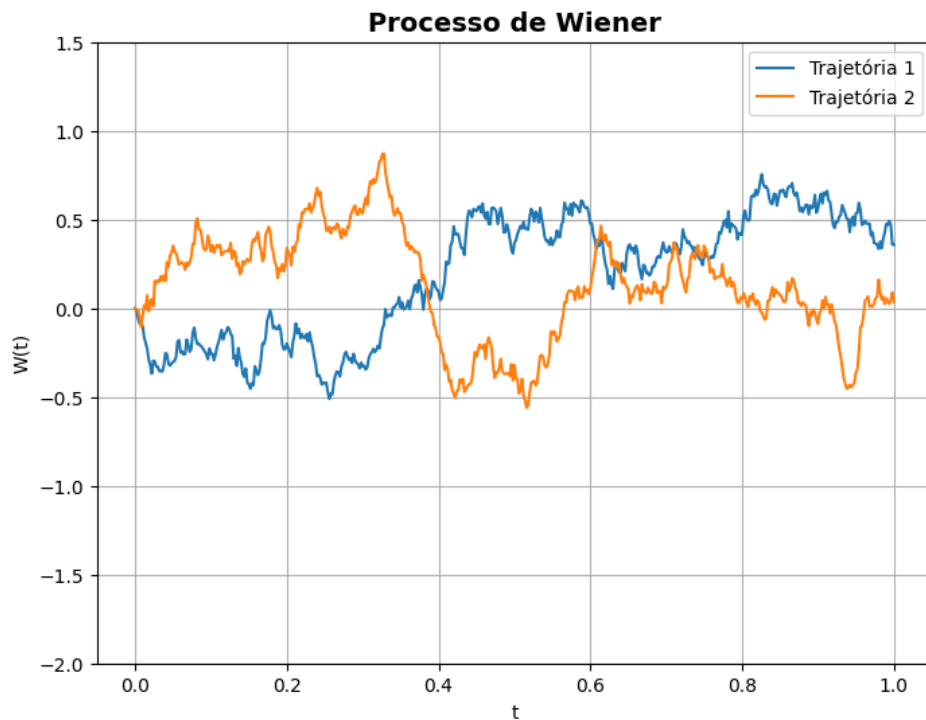
de  $x_t$  tomar o valor  $n_{\ell+1}$  no instante  $t = \ell + 1$ , dado que ela tenha tomado o valor  $n_\ell$  no instante  $t = \ell$ , então o processo estocástico é um processo markoviano. Em palavras mais adequadas à física estatística, um processo markoviano é aquele em que a probabilidade condicional de  $x_t$  tomar um determinado valor num instante depende somente do valor que ela tenha tomado no instante anterior (Iosifescu, 2014).

## 2.2 Processo de Wiener

Outro tipo de processo estocástico crucial para se entender melhor o Movimento Browniano e suas particularidades é o processo de Wiener, que possui na literatura definições que o classificam como o próprio MB de modo “ideal”, mas para o propósito deste trabalho é essencial que haja uma diferenciação e trazer uma definição mais abrangente do processo. Define-se como processo de Wiener, um processo contínuo com incrementos independentes, ou seja, a variação num determinado intervalo de tempo é independente das variações em outros intervalos de tempo, e incrementos Gaussianos, que constitui a base matemática para modelagem de flutuações térmicas em sistemas físicos (Ricciardi, 1976).

As variações do processo ao longo de qualquer intervalo de tempo são distribuídas normalmente, com média zero e variância proporcional ao tamanho do intervalo. Ou seja, tomando dois instantes de tempo  $t$  e  $t + \Delta t$ , a variação  $\Delta W = W(t + \Delta t) - W(t)$  segue uma distribuição normal, onde esse  $\Delta W$  representa o incremento. A variância do processo aumenta linearmente com o tempo, ou seja, o processo é não estacionário.

Figura 5 – Exemplo de duas trajetórias simbolizando o processo de Wiener. O código escalona os incrementos para que tenham variância  $dt$ , e soma o cumulativo dos incrementos para gerar cada trajetória, como exige o processo de Wiener.



Fonte: Próprio autor.

### 2.3 Processo de Itô

Diante do exposto, é necessária uma ferramenta matemática que aborde de maneira concisa processos aleatórios, neste contexto, a fórmula de Itô desempenha papel central na construção de integrais estocásticas. Diferentemente da integral de Riemann, usada para funções determinísticas suaves, as integrais de Itô são definidas para funções que dependem de processos estocásticos, como  $W(t)$ , e consideram a aleatoriedade presente nesses sistemas.

Considerando uma função contínua e diferenciável  $x(t)$  com  $x(0) = 0$ . A integral  $x(T)^2 = 2 \int_0^T x(t) dx(t)$  é válida no cálculo “tradicional”. Contudo, ao utilizar o processo de Wiener  $W(t)$ , expressões semelhantes surgem, porém com termos adicionais conhecidos como correções de Itô (Shi *et al.*, 2012). Por exemplo:

$$W(T)^2 = \int_0^T dt + 2 \int_0^T W(t) dW(t) \quad (2.1)$$

$$W(T)^3 = 3 \int_0^T W(t)^2 dW(t) + 3 \int_0^T W(t) dt \quad (2.2)$$

Essas correções ocorrem porque o movimento Browniano não possui variação nula como funções suaves. Termos como  $\int_0^T W(t) dW(t)$  são bem definidos no sentido estocástico e constituem o núcleo do cálculo de Itô.

Um processo estocástico  $\xi(t)$ , com  $t \geq 0$ , é chamado de processo de Itô se pode ser escrito como:

$$\xi(T) = \xi(0) + \int_0^T a(t) dt + \int_0^T b(t) dW(t) \quad (2.3)$$

onde  $a(t)$  é uma função que representa a tendência (drift) do processo, e  $b(t)$  representa o quão aleatório é o sistema,  $dW(t)$  representa o incremento do processo de Wiener (Sato; Nakagawa, 2014).

Neste caso, a notação diferencial de Itô é usada para representar o processo de forma compacta:

$$d\xi(t) = a(t) dt + b(t) dW(t) \quad (2.4)$$

A fórmula de Itô é análoga à regra da cadeia do cálculo diferencial clássico, porém adaptada ao contexto estocástico. Seja  $F(t, x)$  uma função suficientemente suave, e considere que

$W(t)$  é um movimento Browniano. Suponha que  $\xi(t) = W(t)$  seja um processo de Itô. Então:

Se  $F(t, x)$  possui derivadas parciais contínuas  $F'_t$ ,  $F'_x$  e  $F''_{xx}$ , então:

$$F(T, W(T)) - F(0, W(0)) = \int_0^T \left( F'_t(t, W(t)) + \frac{1}{2} F''_{xx}(t, W(t)) \right) dt + \int_0^T F'_x(t, W(t)) dW(t) \quad (2.5)$$

Em notação diferencial, essa expressão é escrita como:

$$dF(t, W(t)) = \left( F'_t(t, W(t)) + \frac{1}{2} F''_{xx}(t, W(t)) \right) dt + F'_x(t, W(t)) dW(t) \quad (2.6)$$

## 2.4 Equação de Langevin

Alguns anos após os estudos de Einstein sobre o movimento Browniano, Paul Langevin detalhou um estudo acerca de uma generalização sobre o que Einstein havia proposto e sugeriu que o movimento Browniano de uma partícula que esteja fora de um campo de força conservativo pode ser escrito através de uma equação diferencial da forma que veremos posteriormente. Langevin conseguiu recuperar todo o trabalho de Einstein com ferramentas mais sofisticadas do ponto de vista teórico, o que consequentemente trouxe uma simplificação do problema.

Retornando ao movimento Browniano, podemos utilizar a equação de Langevin como ponto de partida para descrever o processo estocástico que envolve a trajetória de uma partícula de massa  $m$  gerada pela colisão com as moléculas de um meio. Dessa equação detalharei os termos particulares de sua formulação original e suas “derivações”, bem como demonstrarei como, a partir deles, pode-se determinar detalhes importantes sobre a aleatoriedade do sistema. Podendo a equação ser escrita como:

$$m \frac{dv}{dt} = -\alpha v + F_a(t) \quad (2.7)$$

Sendo  $v = \frac{dx}{dt}$  = velocidade e  $x$  a posição da partícula. Essa equação descreve duas forças atuantes na partícula, a força de atrito, representada por “ $-\alpha v$ ”, onde  $\alpha$  é o coeficiente de atrito, e a força de carácter aleatório que se dá pelos impactos com as moléculas do meio (Tomé, 2001).

Como não há direção preferencial para as colisões da partícula com as moléculas, as forças que atuam em diferentes direções se cancelam mutuamente ao longo do tempo, assim, em média, a força aleatória devida às colisões é nula:

$$\langle F_a(t) \rangle = 0 \quad (2.8)$$

Ao dividir a Equação 2.1 por  $m$ , podemos reescrever a equação de Langevin como:

$$\frac{dv}{dt} = -\gamma v + A(t) \quad (2.9)$$

Sendo  $\gamma = \frac{\alpha}{m} > 0$  e  $A(t) = \frac{F_a(t)}{m}$ . Ou seja, temos uma equação diferencial de natureza estocástica, como esperado para a descrição de um sistema com essas características, e também o ponto de partida para a resolução do problema, que se dá pela procura da densidade de probabilidades (Salinas, 1999).

Além da formulação clássica da equação de Langevin, é importante destacar que esse modelo pertence a uma classe de equações diferenciais estocásticas, sendo amplamente utilizado para descrever a evolução temporal de sistemas com graus de liberdade influenciados por forças determinísticas e aleatórias.

Nesse contexto, a equação de Langevin pode ser interpretada como:

$$\dot{x} = \mu F(x, \lambda) + \zeta(t) \quad (2.10)$$

onde  $\dot{x}$  representa a velocidade da partícula,  $\mu$  é o coeficiente de mobilidade,  $F(x, \lambda)$  é a força externa que depende da posição  $x$  e de um parâmetro de controle  $\lambda$ ,  $\zeta(t)$  é o termo de ruído térmico (ruído branco gaussiano) que representa as flutuações aleatórias do meio.

O ruído térmico é caracterizado pelas propriedades estatísticas:

$$\langle \zeta(t) \rangle = 0, \quad \langle \zeta(t) \zeta(t') \rangle = 2D\delta(t - t') \quad (2.11)$$

Essas relações mostram que o ruído tem média nula e correlação temporal do tipo delta de Dirac, indicando que o sistema é markoviano, ou seja, sua evolução depende apenas do estado atual, e não do histórico anterior. A presença do ruído térmico é fundamental para garantir o equilíbrio termodinâmico (Sekimoto, 1998). Se esse termo fosse removido, a velocidade da partícula tenderia a zero com o tempo, violando o teorema da equipartição da energia, que estabelece que a energia média em equilíbrio não é nula:

$$\langle v^2(t) \rangle_{\text{eq}} = \frac{3k_B T}{m} \quad (2.12)$$

onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann,  $T$  é a temperatura do reservatório térmico e  $m$  é a massa da partícula.

No equilíbrio, o coeficiente de difusão  $D$  e a mobilidade  $\mu$  estão relacionados pela relação de Einstein:

$$D = \mu k_B T \quad (2.13)$$

Essa equação conecta propriedades dinâmicas (mobilidade) com estatísticas (difusão), refletindo o chamado teorema da flutuação-dissipação.

A força  $F(x, \lambda)$  pode conter tanto componentes conservativas quanto não conservativas. Assim, podemos escrevê-la como:

$$F(x, \lambda) = -\frac{\partial V(x, \lambda)}{\partial x} + f(x, \lambda) \quad (2.14)$$

onde  $V(x, \lambda)$  é um potencial e  $f(x, \lambda)$  representa forças externas não conservativas que podem variar com o tempo ou com parâmetros externos.

## 2.5 Equação de Fokker-Planck

A equação de Fokker-Planck, também conhecida como equação de Kolmogorov direta (Sharma; Patel, 2010), descreve a evolução temporal da densidade de probabilidade condicional de um processo estocástico de Itô. Dado um processo unidimensional

$$dX_t = f(X_t, t) dt + g(X_t, t) dW_t, \quad (2.15)$$

onde  $f(x, t)$  é o coeficiente de drift e  $g(x, t)$  é o coeficiente de difusão, a densidade de probabilidade  $P(x, t|x_0, t_0)$  satisfaz:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} [f(x, t) P(x, t)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [g^2(x, t) P(x, t)]. \quad (2.16)$$

O ponto de partida é a equação de Chapman-Kolmogorov para densidades de transição (Karush, 1961):

$$P(x_3, t_3|x_1, t_1) = \int_{-\infty}^{\infty} P(x_3, t_3|x_2, t_2) P(x_2, t_2|x_1, t_1) dx_2, \quad (2.17)$$

onde  $t_1 < t_2 < t_3$ . Tomando a expansão em Taylor para pequenos incrementos de tempo  $\Delta t = t_2 - t_1$  e usando a notação de Itô para os momentos, obtêm-se, ao considerar apenas até segunda ordem, a forma diferencial que leva à equação (2.16).

O termo de drift  $f(x, t)$  descreve a velocidade média de deslocamento do estado  $x$  ao longo do tempo. Já o termo de difusão  $D(x, t) = \frac{1}{2} g^2(x, t)$  quantifica a taxa de dispersão probabilística, associada às flutuações aleatórias. Enquanto a densidade  $P(x, t)$  deve satisfazer:

$$P(x, t) \geq 0, \quad \int_{-\infty}^{\infty} P(x, t) dx = 1 \quad \forall t \geq t_0. \quad (2.18)$$

Dependendo do domínio físico, impõem-se condições de contorno de absorção, reflexão ou periodicidade.

A equação de Fokker–Planck é o formulismo equivalente, em termos de distribuições, à equação de Langevin (2.15). Enquanto a equação de Langevin descreve trajetórias estocásticas individuais, a de Fokker-Planck fornece a evolução da probabilidade de encontrar o sistema em  $x$ .

### 3 METODOLOGIA

Inspirado na abordagem do artigo *Nonlinear stochastic modeling with Langevin regression* (Callaham *et al.*, 2021), este trabalho utiliza simulações de partículas sujeitas a ruído térmico em um potencial duplo aplicado em três dimensões para realizar a inferência do campo de forças determinístico (drift) e do coeficiente de difusão local. Tal como demonstrado no artigo, com potencial unidimensional, empregamos o método SINDy para identificar equações dinâmicas esparsas diretamente das trajetórias simuladas. Uma biblioteca de termos candidatos é utilizada para a identificação de equações diferenciais parciais (EDPs) e equações diferenciais implícitas (Silva *et al.*, 2020). Revelando boa concordância com as expressões analíticas derivadas do potencial.

Este estudo apresenta, com riqueza de detalhes, a metodologia empregada na simulação de trajetórias tridimensionais de partículas sujeitas à dinâmica de Langevin, na resolução dos operadores adjuntos da equação de Fokker–Planck e na posterior inferência dos parâmetros que regem a dinâmica a partir das trajetórias obtidas.

#### 3.1 Simulação das Trajetórias

As trajetórias são geradas via algoritmo Euler-Maruyama integrando a equação de Langevin no potencial polinomial:

$$V(x, y, z) = -\frac{\alpha}{2}(x^2 + y^2 + z^2) + \frac{\beta}{4}(x^4 + y^4 + z^4). \quad (3.1)$$

O termo de drift é dado por:

$$\mathbf{a}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \alpha x - \beta x^3 - \gamma x \\ \alpha y - \beta y^3 - \gamma y \\ \alpha z - \beta z^3 - \gamma z \end{pmatrix}, \quad (3.2)$$

e o ruído térmico aparece como um termo aleatório gaussiano com coeficiente de difusão  $D$ . Os parâmetros típicos utilizados nas simulações foram  $\alpha = 15.0$ ,  $\beta = 15.0$ ,  $\gamma = 0.1$ ,  $D = 1.0$ ,  $k_B T = 1.0$ , passo de tempo de integração  $\Delta t = 10^{-6}$  s, amostragem das trajetórias a cada  $\Delta t_{\text{out}} = 10^{-4}$  e Número de trajetórias simuladas:  $N_{\text{sim}} = 20$ .



### 3.2 Operador Adjunto de Fokker-Planck

O operador adjunto estacionário unidimensional é construído por diferenças finitas de segunda ordem para difusão e primeira ordem para drift:

$$L_{\text{adj}}^{(1\text{D})} = D \frac{d^2}{dx^2} - \frac{d}{dx} [a(x) \cdot]. \quad (3.3)$$

Em três dimensões, combinamos os operadores 1D através do produto de Kronecker:

$$L_{\text{adj}}^{(3\text{D})} = L_x \otimes I_y \otimes I_z + I_x \otimes L_y \otimes I_z + I_x \otimes I_y \otimes L_z, \quad (3.4)$$

onde  $I$  representa a matriz identidade.

Embora a inferência dos parâmetros dinâmicos (drift e difusão) neste trabalho seja realizada a partir das trajetórias simuladas, uma parte importante do código e da fundamentação teórica é dedicada à construção e resolução do operador adjunto da equação de Fokker–Planck. Essa abordagem tem múltiplas finalidades, como a validação da simulação de Langevin, dado que a equação de Fokker–Planck descreve a evolução da densidade de probabilidade associada a uma partícula sujeita a ruído térmico e forças determinísticas. Sua solução estacionária,  $p_{\text{est}}(r)$ , é obtida como o autovetor associado ao autovalor nulo do operador adjunto. Essa solução é comparada aos histogramas obtidos das trajetórias de Langevin, validando se o sistema simulado converge para o comportamento estatístico esperado.

Também há uma relação com o potencial aplicado, pois, em equilíbrio, a densidade de probabilidade estacionária se relaciona com o potencial externo da forma:

$$p_{\text{est}}(r) \propto \exp \left( -\frac{V(r)}{D} \right). \quad (3.5)$$

Dessa forma, a comparação entre a solução numérica da equação de Fokker–Planck e a forma analítica permite verificar se a simulação obedece ao equilíbrio termodinâmico imposto pelo potencial simulado.

### 3.3 Construção de Índice Espacial para Inferência

Para acelerar a estimação de drift e difusão locais, discretizamos cada dimensão em  $N_{\text{bins}}$  uniformes em  $x, y, z$ , e indexamos cada ponto de trajetória ao seu bin correspondente. Esse índice permite a extração eficiente de todos os deslocamentos que partem de um

bin específico, o cálculo rápido de estatísticas locais para um dado passo temporal  $\tau$  e a paralelização do processo de inferência.

### 3.4 Inferência de Parâmetros

Neste trabalho, utilizamos dois métodos distintos para a inferência dos parâmetros dinâmicos (drift e difusão) a partir das trajetórias simuladas: o método de Kramers-Moyal e a modelagem baseada na biblioteca PySINDy (Kaheman *et al.*, 2020).

#### 1. Método de Kramers-Moyal (Inferência Local):

Este método consiste na aplicação direta da expansão de Kramers-Moyal aos dados estocásticos. A ideia central é estimar os momentos condicionais de primeira e segunda ordem do deslocamento da partícula dentro de uma janela de tempo curta. Esses momentos correspondem, respectivamente, aos coeficientes de drift e difusão local que aparecem na equação de Fokker-Planck, que descreve a evolução temporal da densidade de probabilidade  $P(x, t)$ :

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = - \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} [A_i(x) P(x, t)] + \sum_i \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} [D_i(x) P(x, t)], \quad (3.6)$$

onde  $A_i(x)$  representa o campo de drift e  $D_i(x)$  o coeficiente de difusão ao longo da  $i$ -ésima coordenada espacial.

Para cada bin e intervalo de tempo  $\tau$ , computa-se:

$$A_i(\mathbf{x}) = \frac{\langle \Delta x_i \rangle}{\tau \Delta t}, \quad D_i(\mathbf{x}) = \frac{\langle (\Delta x_i)^2 \rangle}{2 \tau \Delta t}, \quad (3.7)$$

onde  $\Delta x_i = x_i(t + \tau \Delta t) - x_i(t)$  representa o deslocamento ao longo da  $i$ -ésima coordenada,  $\tau$  é o número de passos temporais considerados na estimativa, e  $\Delta t$  é o intervalo de tempo entre amostras. As médias são computadas condicionalmente em torno da vizinhança de  $x$  (Gorjão; Meirinhos, 2019).

Esse método é chamado de local porque a inferência é feita ponto a ponto (ou bin a bin), sem impor nenhuma estrutura funcional *a priori* para os campos de drift ou difusão. Em contrapartida, sofre com a sensibilidade ao ruído e à escolha de  $\tau$ , sendo necessário balancear a resolução estatística com a fidelidade temporal.

#### 2. Modelagem com PySINDy (Sparse Identification of Nonlinear Dynamics):

O segundo método baseia-se na abordagem de identificação esparsa de dinâmicas não-lineares, implementada via biblioteca PySINDy. A proposta do SINDy é reconstruir uma equação determinística para o drift diretamente das trajetórias, assumindo que ele pode ser descrito por uma combinação esparsa de funções não-lineares pré-definidas. O modelo assume a forma:

$$\dot{x} = \sum_j \xi_j \theta_j(x), \quad (3.8)$$

onde  $\theta_j(x)$  são funções base (por exemplo, termos polinomiais como  $x^2$ ,  $xy$ , etc.), e os coeficientes  $\xi_j$  são ajustados via regressão regularizada, especificamente usando o algoritmo STLSQ (Sequential Thresholded Least Squares), pois essa abordagem impõe esparsidade na solução, garantindo que apenas os termos mais relevantes da biblioteca sejam selecionados. Isso é fundamental para evitar “overfitting”, já que bibliotecas grandes (ex.: polinômios até grau 5) gerariam modelos sensíveis a ruídos se ajustados por mínimos quadrados ordinários. Foi utilizada uma biblioteca polinomial com termos até o grau 5, de forma a permitir a modelagem de comportamentos não-lineares complexos.

Diferentemente do método de Kramers-Moyal, a modelagem com SINDy resulta em uma representação global da dinâmica, o que permite extrapolações e análise simbólica do sistema. No entanto, ela não infere diretamente o termo difusivo (aleatório), tratando-se de um modelo determinístico.

Em resumo, a investigação de sistemas estocásticos não-lineares em três dimensões exige um método que integra simulações numéricas, teoria de processos estocásticos e técnicas de análise de dados. O ponto central desta metodologia reside na conexão entre descrições microscópicas representadas por trajetórias individuais de partículas, e propriedades macroscópicas emergentes, capturadas através da equação de Fokker-Planck.

As trajetórias estocásticas são geradas através da integração numérica da equação de Langevin tridimensional, onde partículas sujeitas a um potencial cúbico  $V(x,y,z) = -\frac{\alpha}{2}(x^2 + y^2 + z^2) + \frac{\beta}{4}(x^4 + y^4 + z^4)$  evoluem sob a influência combinada de forças determinísticas e flutuações térmicas. O termo de drift  $a(r)$ , derivado deste potencial, incorpora não-linearidades essenciais que dão origem a múltiplos estados estáveis e transições entre eles. A dinâmica temporal é resolvida numericamente utilizando o método de Euler-Maruyama com passo temporal  $\Delta t = 10^{-6}$  s, garantindo estabilidade numérica

através da condição  $\Delta t < |\nabla \cdot \mathbf{a}|^{-1}$ , enquanto a amostragem das trajetórias em intervalos de  $10^{-4}$  s permite capturar tanto flutuações rápidas quanto evolução de longo prazo.

Na descrição macroscópica, o operador adjunto de Fokker-Planck é construído hierarquicamente, partindo de discretizações unidimensionais que combinam esquemas de diferenças finitas para os termos de difusão e drift. A extensão para três dimensões é realizada através de produtos tensoriais que preservam a estrutura esparsa do operador, permitindo a resolução eficiente do problema espectral em malhas finas. Esta construção explora técnicas avançadas de álgebra linear numérica, incluindo pré-condicionamento adaptativo e métodos iterativos para autovalores, essenciais para lidar com a complexidade computacional inerente a sistemas tridimensionais.

A inferência de parâmetros dinâmicos a partir das trajetórias simuladas emprega duas abordagens complementares. O método de Kramers-Moyal, fundamentado na expansão estocástica de momentos condicionais, proporciona estimativas locais dos coeficientes de drift e difusão através de análise estatística direta dos deslocamentos partícula (Honisch; Friedrich, 2011). Esta técnica, sensível à escolha do intervalo temporal  $\tau$ , requer otimização cuidadosa para equilibrar resolução temporal e precisão estatística. Paralelamente, a identificação esparsa de dinâmicas não-lineares via PySINDy revela a estrutura global do sistema através de combinações otimizadas de funções base polinomiais, capturando acoplamentos não-lineares entre graus de liberdade que emergem em escalas temporais mais longas.

A validação metodológica ocorre em múltiplos níveis, desde verificações internas de consistência, como o teste do teorema flutuação-dissipação e análise de ergodicidade, até comparações quantitativas com soluções analíticas em casos limites. As técnicas empregadas constituem um sistema de métodos coerentes para a investigação de sistemas estocásticos complexos.

### 3.5 Método de Euler-Maruyama

Uma equação diferencial estocástica escalar autônoma pode ser expressa em sua forma integral como:

$$X(t) = X_0 + \int_0^t f(X(s)) ds + \int_0^t g(X(s)) dB_s^{(\omega)}, \quad (3.9)$$

Nessa expressão,  $f$  e  $g$  são funções escalares e  $X_0$  representa a condição inicial

aleatória. A segunda integral é definida com respeito ao movimento browniano  $B_t^{(\omega)}$ , adotando-se a convenção de Itô (Silva, 2013).

A forma diferencial correspondente é:

$$dX(t) = f(X(t))dt + g(X(t))dB_t^{(\omega)}, \quad X(0) = X_0, \quad 0 \leq t \leq T. \quad (3.10)$$

Se  $g \equiv 0$  e  $X_0$  é determinístico, temos a equação diferencial ordinária:

$$\frac{dX(t)}{dt} = f(X(t)), \quad X(0) = X_0, \quad 0 \leq t \leq T. \quad (3.11)$$

### 3.5.1 Integração Numérica com Euler-Maruyama

Para resolver numericamente (3.10), divide-se o intervalo  $[0, T]$  em  $L$  subintervalos de largura  $\Delta t = T/L$ . Seja  $t_j = j\Delta t$ . Aproximamos  $X(t_j)$  por  $X_j$  via o método de Euler-Maruyama (Mao, 2015):

$$X_j = X_{j-1} + f(X_{j-1})\Delta t + g(X_{j-1})(B_{t_j} - B_{t_{j-1}}), \quad j = 1, \dots, L. \quad (3.12)$$

Esta equação resulta da aproximação da forma integral de Itô em subintervalos:

$$X(t_j) = X(t_{j-1}) + \int_{t_{j-1}}^{t_j} f(X(s))ds + \int_{t_{j-1}}^{t_j} g(X(s))dB_s^{(\omega)}. \quad (3.13)$$

O método é usado neste trabalho para integrar a equação de Langevin em três dimensões no potencial:

$$V(x, y, z) = -\frac{\alpha}{2}(x^2 + y^2 + z^2) + \frac{\beta}{4}(x^4 + y^4 + z^4). \quad (3.14)$$

O termo de drift associado é:

$$\mathbf{a}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \alpha x - \beta x^3 - \gamma x & \alpha y - \beta y^3 - \gamma y & \alpha z - \beta z^3 - \gamma z \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

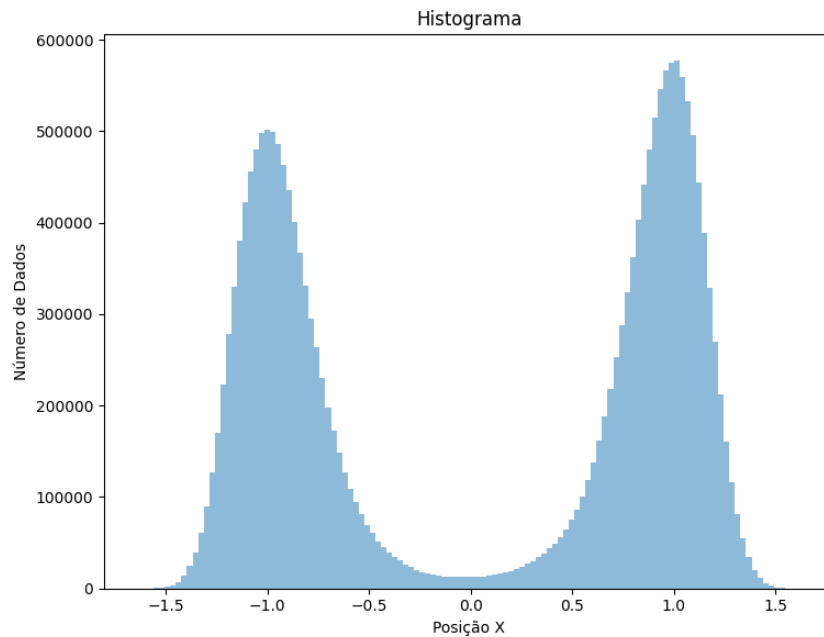
Onde  $\alpha$  é o coeficiente do termo quadrático e representa uma força restauradora linear, que tende a atrair a partícula para a origem, além de controlar a curvatura do potencial próximo à origem.  $\beta$  é o coeficiente do termo quártico, que dá ao potencial a forma de poço duplo. Esse termo é responsável por criar mínimos estáveis fora da origem e tornar o potencial não-linear. E  $\gamma$  é o coeficiente de dissipação linear, que representa o efeito de atrito viscoso.

O ruído térmico aparece como um termo gaussiano com variância  $2D\Delta t$ , modelando a difusão. A discretização resulta em trajetórias que evoluem segundo a equação de Euler-Maruyama em cada componente, como em (3.12). Assim, todo o método de inferência descrito acima está representado em (Silva, 2025) e no Apêndice A deste trabalho.

## 4 RESULTADOS

Antes da geração dos resultados em três dimensões, foi aplicada a metodologia descrita anteriormente apenas em uma dimensão, para ilustrar a aplicabilidade do método. Primeiro foi feito o plot de um histograma para fácil visualização dos dados.

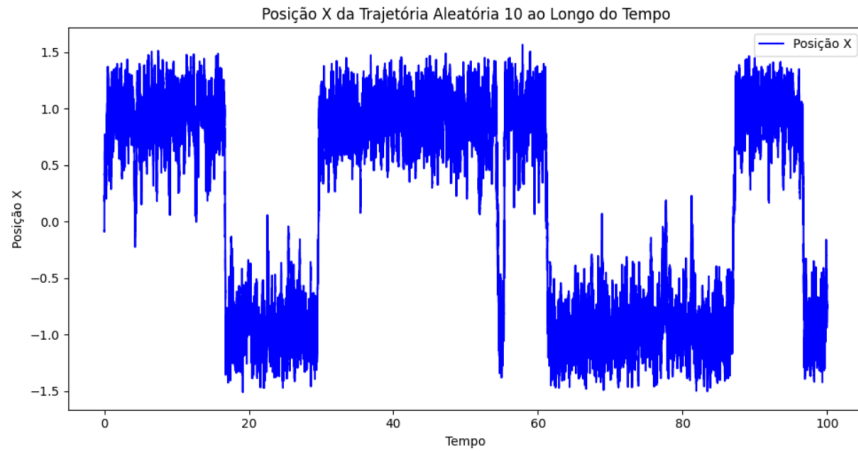
Figura 6 – Histograma com o domínio contínuo do problema dividido em “caixas” a fim de discretizar os dados de trajetória para melhor visualização do movimento da partícula.



Fonte: Próprio autor.

O histograma auxilia na visualização das trajetórias, pois ilustra a discretização do problema em bins e a evolução da partícula sob o potencial a qual está submetida. Outra visualização importante se dá através da escolha de uma trajetória simulada para ver o comportamento da partícula.

Figura 7 – Visualização gráfica de uma trajetória escolhida aleatoriamente para análise do comportamento da partícula no decorrer do tempo.

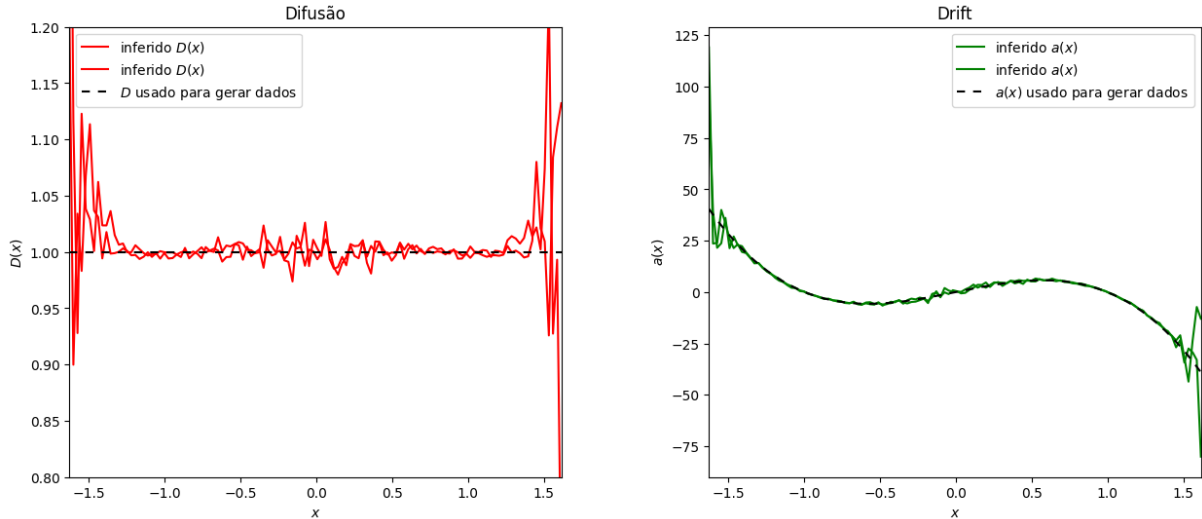


Fonte: Próprio autor.

Nota-se os “saltos” da partícula, condizentes com o formato duplo do potencial que está aplicado, bem como torna possível investigar o comportamento do sistema para qualquer trajetória escolhida dentre as simuladas.

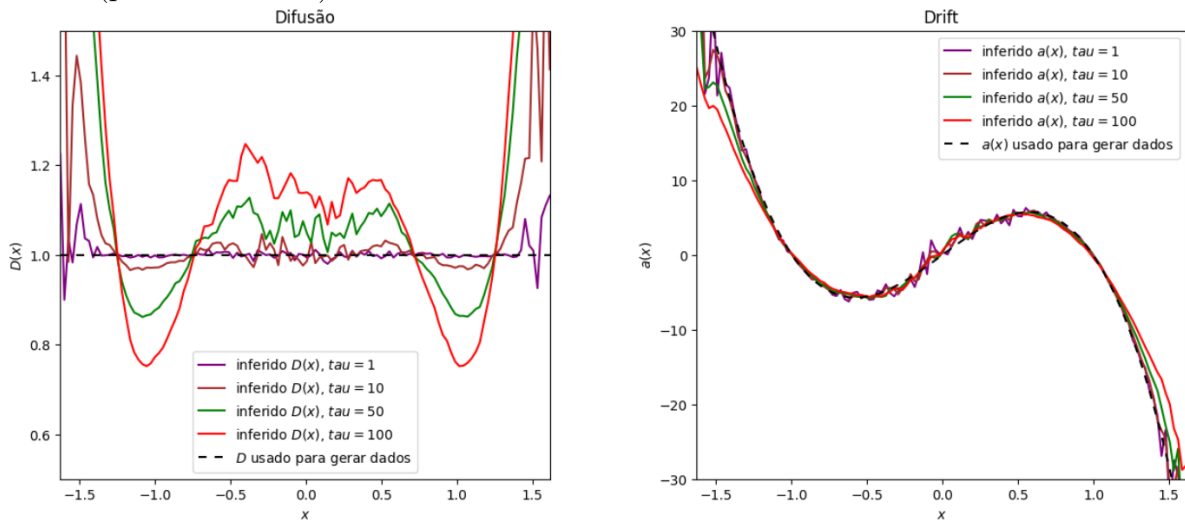
Os parâmetros de drift e difusão também foram inferidos com êxito no algoritmo trabalhado. Para fins de análise desses termos cruciais para a equação de Langevin, foi feita a visualização da inferência em diferentes instantes de tempo  $\tau$ . No presente trabalho, o parâmetro  $\tau$  representa o “lag” temporal, isto é, o número de passos discretos de tempo entre dois pontos sucessivos da trajetória usados para calcular médias estatísticas. O tempo físico correspondente é dado por  $\Delta t_{\text{físico}} = \tau \times \Delta t_{\text{out}}$ , onde  $\Delta t_{\text{out}}$  é o intervalo de tempo entre amostras da trajetória.

Figura 8 – Coeficientes de drift (à direita) e difusão (à esquerda) inferidos para  $\tau = 1$ , utilizando a expansão de Kramers-Moyal. A curva pontilhada representa os valores teóricos utilizados na geração das trajetórias. O drift estimado apresenta excelente concordância com o modelo teórico, mesmo em regiões próximas às bordas. Por outro lado, o coeficiente de difusão mostra oscilações mais visíveis, principalmente fora do centro, onde há menor densidade de dados. Tais flutuações refletem a maior sensibilidade estatística da inferência da difusão, dependente de momentos quadráticos e de boa cobertura amostral.



Fonte: Próprio autor.

Figura 9 – Coeficientes de drift (à direita) e difusão (à esquerda) inferidos via método de Kramers-Moyal para diferentes valores de  $\tau$ . Observa-se que o drift estimado (direita) se mantém próximo ao valor teórico para diferentes  $\tau$ , evidenciando robustez da inferência quanto a esse termo determinístico. Em contraste, o coeficiente de difusão (esquerda) apresenta sensível dependência com o valor de  $\tau$ , especialmente nas bordas do domínio. Isso ocorre devido à acumulação de ruído e à perda de resolução temporal com  $\tau$  maiores, o que afeta mais significativamente a estimativa de variâncias (segunda ordem) do que médias (primeira ordem).



Fonte: Próprio autor.



Quando  $\tau$  aumenta, os deslocamentos passam a refletir não apenas o comportamento local ao redor de  $x$ , mas também a influência de regiões mais distantes no espaço. Isso causa:

- **Superestimação da Difusão:** O termo quadrático se acumula com o tempo, e  $D(x)$  aparece mais distante do valor teórico esperado.
- **Viés no Drift:** A média dos deslocamentos incorpora efeitos não locais, o que suaviza ou distorce o drift inferido.

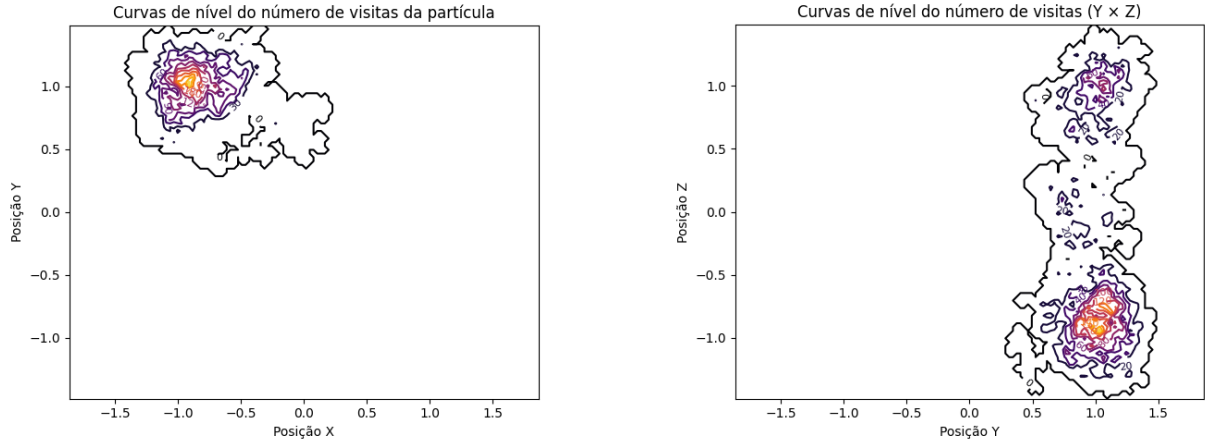
A utilização de histogramas na análise das trajetórias também se mostra vantajosa em três dimensões pois permite a divisão em bins, que agrupa deslocamentos por região espacial para cálculo dos coeficientes de Kramers-Moyal. No contexto deste trabalho, onde partículas evoluem sob um potencial não-linear  $V(x,y,z) = -\frac{\alpha}{2}(x^2 + y^2 + z^2) + \frac{\beta}{4}(x^4 + y^4 + z^4)$ , a construção de histogramas espaciais permite estimar diretamente a densidade de probabilidade estacionária  $p(r)$  a partir das simulações de Langevin. Essa abordagem fornece uma ponte essencial entre as descrições microscópicas e macroscópicas do sistema, permitindo a comparação quantitativa entre as distribuições obtidas numericamente e as soluções teóricas da equação de Fokker-Planck.

A discretização do espaço em  $120^3$  bins, como implementado neste estudo, cria uma estrutura eficiente para a análise local. Em cada célula os coeficientes de Kramers-Moyal são calculados independentemente, possibilitando a reconstrução espacialmente resolvida do drift  $a(r)$  e da difusão  $D(r)$ . Essa estratégia revela padrões importantes do sistema, como a variação espacial dos coeficientes nas proximidades dos poços de potencial (regiões próximas a  $r = (\pm 1, \pm 1, \pm 1)$ ) e ao longo das barreiras energéticas.

Em síntese, a análise por histogramas constitui o eixo central de uma boa visualização das trajetórias, integrando aspectos teóricos, numéricos e computacionais, pois possui a capacidade de transformar trajetórias estocásticas "brutas" em quantidades físicas interpretáveis.

A representação visual através de mapas de calor, que são essencialmente projeções bidimensionais desses histogramas 3D, oferece uma compreensão imediata da estrutura do sistema. Nas figuras apresentadas, observa-se claramente como as partículas se concentram nas regiões de mínimo potencial, enquanto as transições entre poços aparecem como caminhos de baixa densidade de probabilidade.

Figura 10 – Mapa de calor da ocupação espacial da partícula no plano  $xy$  (imagem da esquerda) e no plano  $yz$  (imagem da direita) para uma única trajetória simulada. A escala de cores indica o número de visitas em cada região, as linhas tracejadas representam contornos do potencial, evidenciando os mínimos onde a partícula tende a permanecer e as transições ocasionais entre poços.

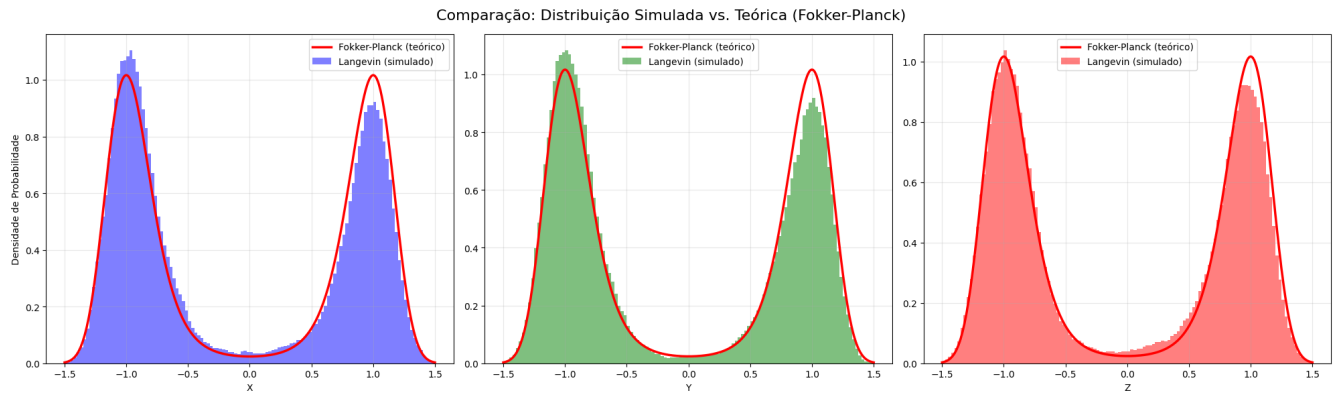


Fonte: Próprio autor.

#### 4.1 Análise de Trajetórias em Três Dimensões

A visualização de trajetórias individuais constitui uma ferramenta essencial para a compreensão qualitativa da dinâmica do sistema estudado. O código desenvolvido para plotar as posições  $(x, y, z)$  em função do tempo oferece um primeiro contato direto com o comportamento das partículas sob a influência do potencial cúbico  $V(x, y, z) = -\frac{\alpha}{2}(x^2 + y^2 + z^2) + \frac{\beta}{4}(x^4 + y^4 + z^4)$ . Através dessa análise visual, podemos identificar imediatamente características fundamentais da dinâmica do problema, como a tendência das partículas a se concentrarem nas proximidades dos mínimos de potencial localizados em  $\mathbf{r} \approx (\pm 1, \pm 1, \pm 1)$ , enquanto ocasionalmente realizam transições entre esses poços devido às flutuações térmicas.

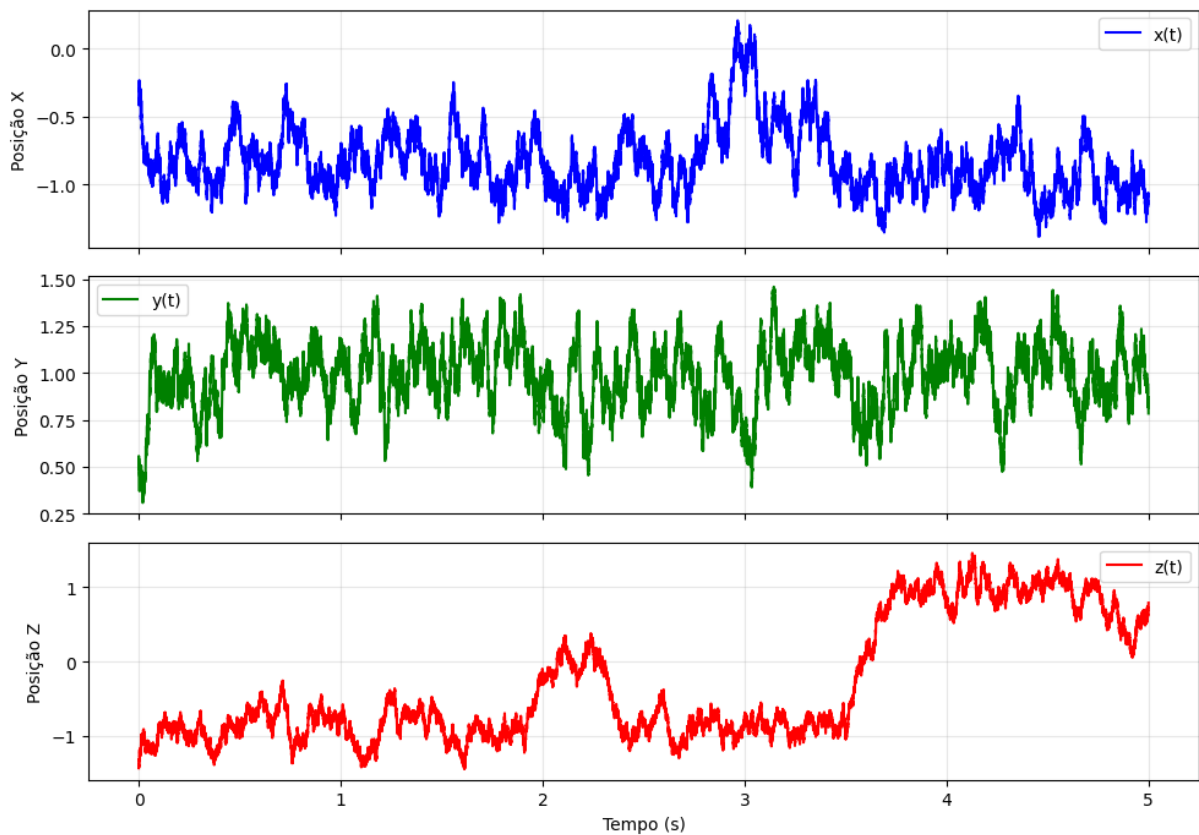
Figura 11 – Histograma comparativo entre o modelo de simulação (via equação de Langevin) e o modelo teórico (equação de Fokker-Planck), com o domínio contínuo do problema dividido em "caixas" a fim de discretizar os dados de trajetória para melhor visualização do movimento da partícula.



Fonte: Próprio autor.

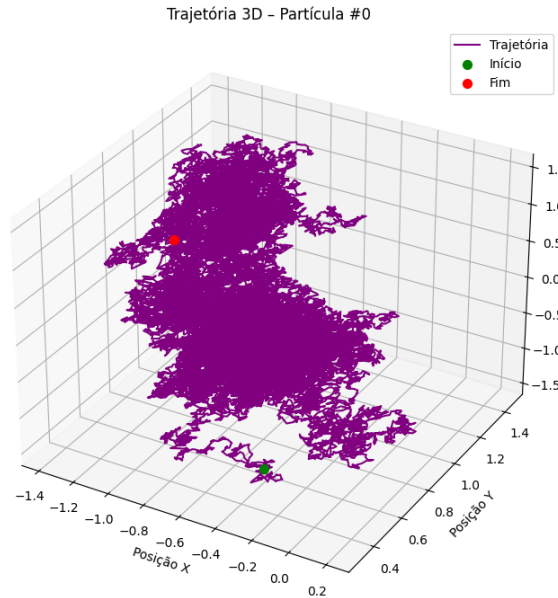
Figura 12 – Trajetória temporal de uma única partícula em cada componente espacial. Nota-se que, enquanto em  $z$  a partícula realiza transições entre os dois mínimos do potencial, em  $x$  e  $y$  ela permanece confinada em um mesmo poço durante o intervalo observado.

Trajetória da partícula 0



Fonte: Próprio autor.

Figura 13 – Trajetória tridimensional de uma única partícula simulada no sistema estudado, com destaque para os pontos inicial (verde) e final (vermelho). Observa-se que a partícula percorre diferentes regiões do espaço de fases, realizando sucessivas transições entre os mínimos do potencial duplo. Essas transições são impulsionadas pela interação entre o drift determinístico, derivado do potencial, e o ruído estocástico representado pelo termo difusivo. A visualização evidencia o caráter aleatório e não retilíneo do movimento, típico de processos estocásticos.



Fonte: Próprio autor.

Os gráficos temporais revelam padrões distintos em diferentes regiões do espaço de fase. Nas vizinhanças dos mínimos de potencial, observamos pequenas oscilações que refletem o comportamento do sistema, com frequências características determinadas principalmente pelos parâmetros  $\alpha$  e  $\gamma$ . À medida que as partículas se afastam dessas regiões, a influência dos termos cúbicos torna-se dominante, resultando em dinâmicas altamente não-lineares que eventualmente levam a transições entre os poços do potencial. Essas transições aparecem nos gráficos como saltos rápidos entre valores positivos e negativos nas componentes da posição.

Também foi possível a geração da trajetória em três dimensões, facilitando a visualização do comportamento real da partícula, bem como podendo visualizar a projeção em cada eixo.

Além de seu valor diagnóstico, essas visualizações servem como verificação crucial da implementação numérica. A amplitude das flutuações deve ser compatível com o valor especificado para  $D$ , enquanto a distribuição geral das posições deve refletir o equilíbrio térmico esperado.

A análise temporal complementa de maneira fundamental as distribuições espaciais mostradas nos mapas de calor e histogramas. Enquanto estes últimos fornecem uma visão estatística do conjunto de trajetórias, os gráficos temporais revelam a dinâmica que gera essas distribuições. Essa combinação de perspectivas é particularmente valiosa para sistemas tridimensionais complexos, onde a simples inspeção dos dados brutos pode ser muito complexa.

Na prática, a visualização de múltiplas trajetórias individuais permite identificar comportamentos atípicos ou eventos raros que poderiam passar despercebidos em análises puramente estatísticas. Essa capacidade é crucial para validar a ergodicidade do sistema, ou seja, a equivalência entre médias temporais ao longo de uma única trajetória longa e médias sobre o ensemble de partículas. A consistência observada entre diferentes realizações do ruído estocástico reforça a confiabilidade dos resultados numéricos e sua interpretação física.

Após análise das trajetórias, foi feita a inferência dos momentos de Kramers–Moyal para a componente  $X$ . Para cada valor de passo temporal  $\tau$ , calculamos o estimador de primeira ordem (drift)

$$D^{(1)}(x) = \frac{\langle \Delta x \rangle}{\tau \Delta t}$$

e o estimador de segunda ordem (difusão)

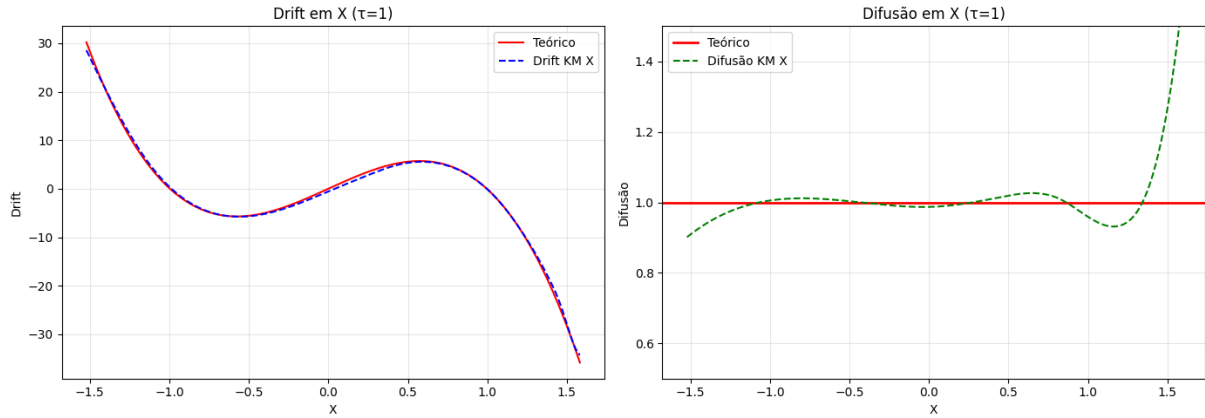
$$D^{(2)}(x) = \frac{\langle (\Delta x)^2 \rangle}{2 \tau \Delta t},$$

onde  $\Delta x = x(t + \tau \Delta t) - x(t)$ . No painel da esquerda de cada figura, comparamos o drift inferido com a forma analítica em diferentes instantes de tempo

$$A_{\text{terico}}(x) = (\alpha - \gamma)x - \beta x^3,$$

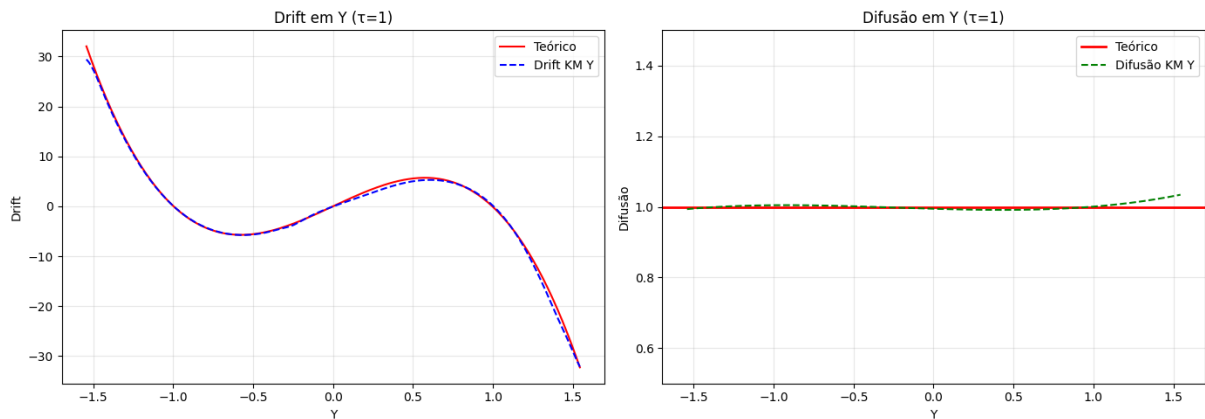
enquanto no painel da direita mostramos a difusão local inferida em relação ao valor constante  $D = 1$  utilizado na simulação. A variação de  $\tau$  permite observar o efeito de tempo finito na convergência dos estimadores ao processo Markoviano ideal.

Figura 14 – Inferência dos momentos de Kramers–Moyal para a componente  $X$  com passo temporal  $\tau = 1$  (correspondente a  $0,1\text{ ms}$  de tempo físico). No painel esquerdo, comparamos o drift estimado (linha tracejada azul) com a forma analítica  $A_{\text{teórico}}(x) = (\alpha - \gamma)x - \beta x^3$  (linha contínua vermelha). No painel direito, mostramos a difusão local inferida (linha tracejada verde) em relação ao valor constante  $D = 1$  utilizado na simulação (linha contínua vermelha).



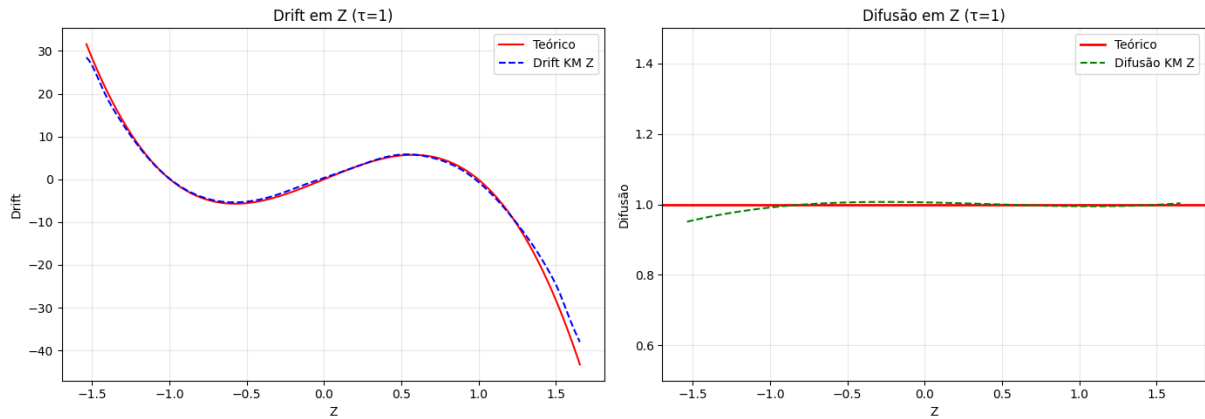
Fonte: Próprio autor.

Figura 15 – Comparação entre os coeficientes de drift (à esquerda) e difusão (à direita) inferidos numericamente ao longo da coordenada  $y$ , utilizando o método de Kramers–Moyal com  $\tau = 1$  (correspondente a  $0,1\text{ ms}$  de tempo físico). As curvas teóricas estão indicadas em vermelho, enquanto as estimativas numéricas aparecem tracejadas.



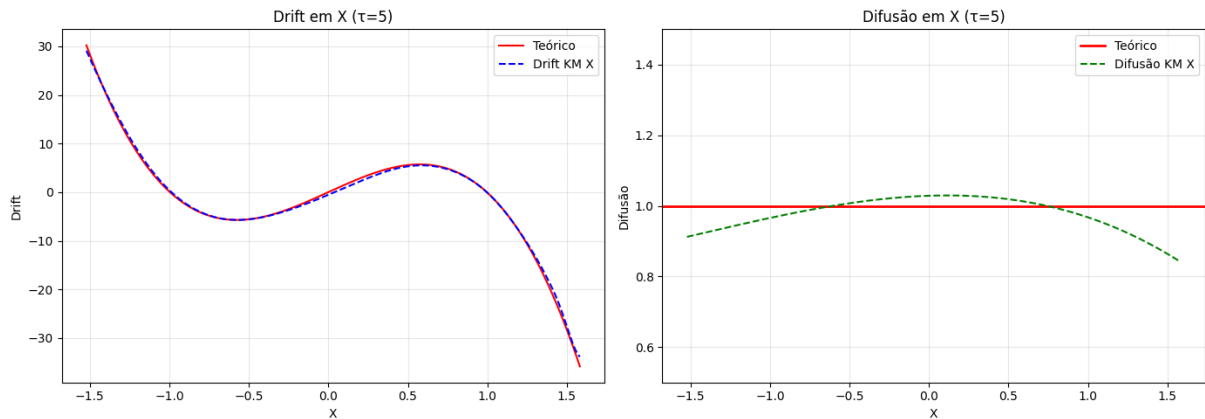
Fonte: Próprio autor.

Figura 16 – Comparação entre os coeficientes de drift (à esquerda) e difusão (à direita) ao longo de  $z$ , obtidos via inferência de Kramers-Moyal com  $\tau = 1$  (0,1 ms em tempo físico). A curva teórica é exibida em vermelho e a estimativa numérica em azul (drift) ou verde (difusão).



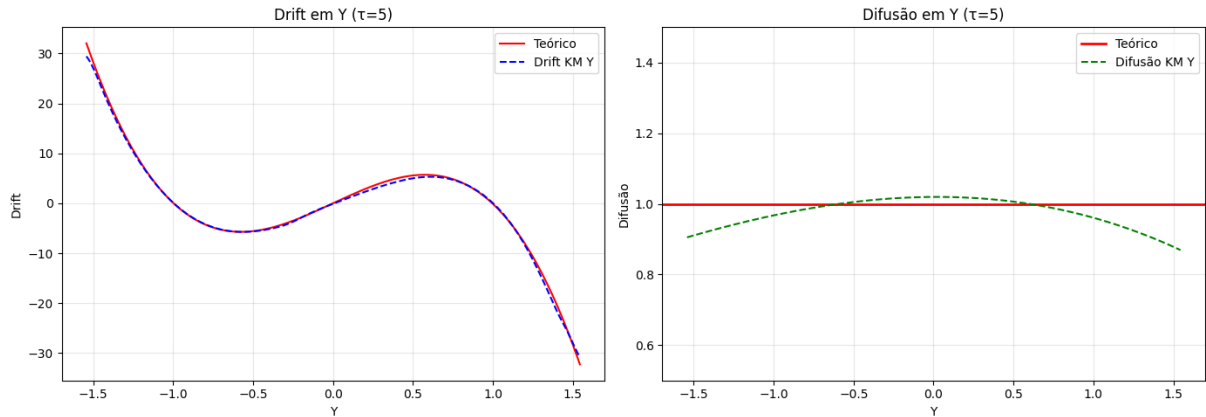
Fonte: Próprio autor.

Figura 17 – Comparação entre os coeficientes de drift (à esquerda) e difusão (à direita) ao longo de  $x$ , obtidos via inferência de Kramers-Moyal com  $\tau = 5$  (0,5 ms em tempo físico).



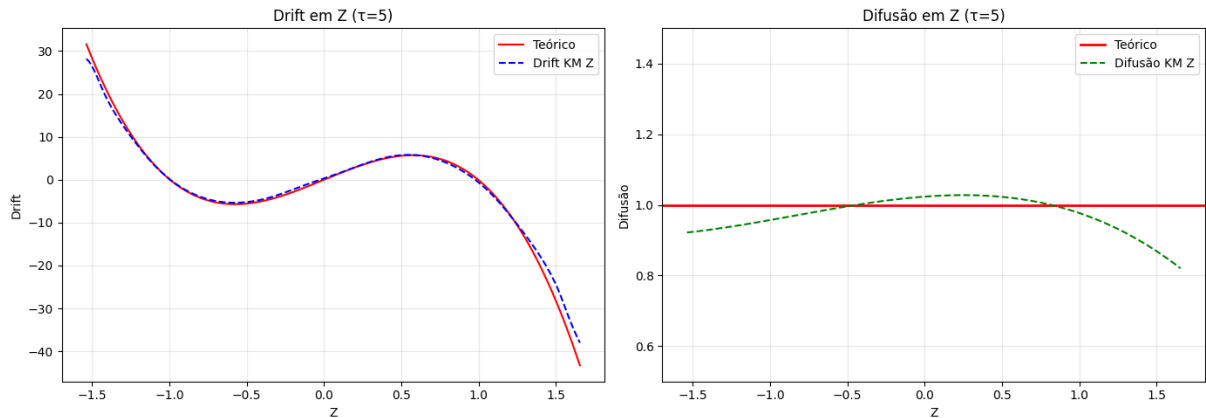
Fonte: Próprio autor.

Figura 18 – Comparação entre os coeficientes de drift (à esquerda) e difusão (à direita) ao longo de  $y$ , obtidos via inferência de Kramers-Moyal com  $\tau = 5$  (0,5ms em tempo físico).



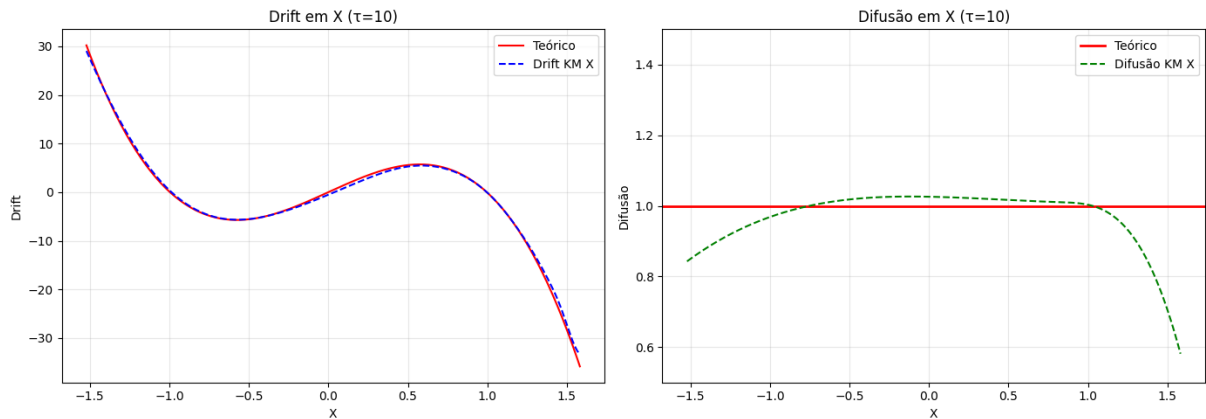
Fonte: Próprio autor.

Figura 19 – Comparação entre os coeficientes de drift (à esquerda) e difusão (à direita) ao longo de  $z$ , obtidos via inferência de Kramers-Moyal com  $\tau = 5$  (0,5ms em tempo físico).



Fonte: Próprio autor.

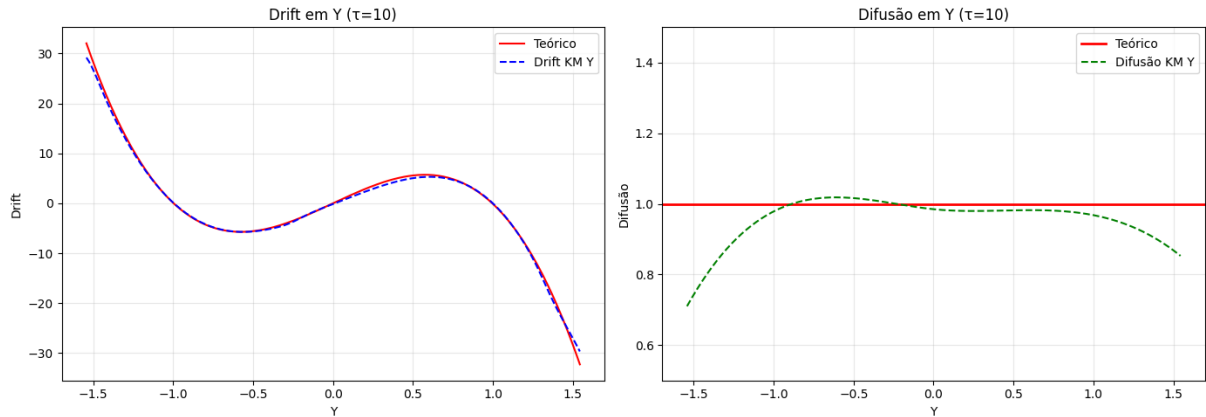
Figura 20 – Comparação entre os coeficientes de drift (à esquerda) e difusão (à direita) ao longo de  $x$ , obtidos via inferência de Kramers-Moyal com  $\tau = 10$  (1ms em tempo físico).



Fonte: Próprio autor.

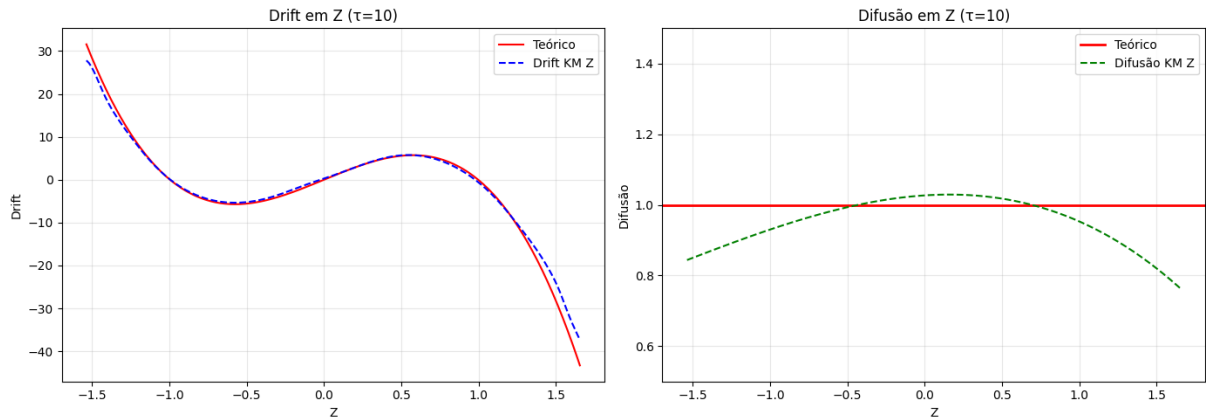


Figura 21 – Comparação entre os coeficientes de drift (à esquerda) e difusão (à direita) ao longo de  $y$ , obtidos via inferência de Kramers-Moyal com  $\tau = 10$  (1ms em tempo físico).



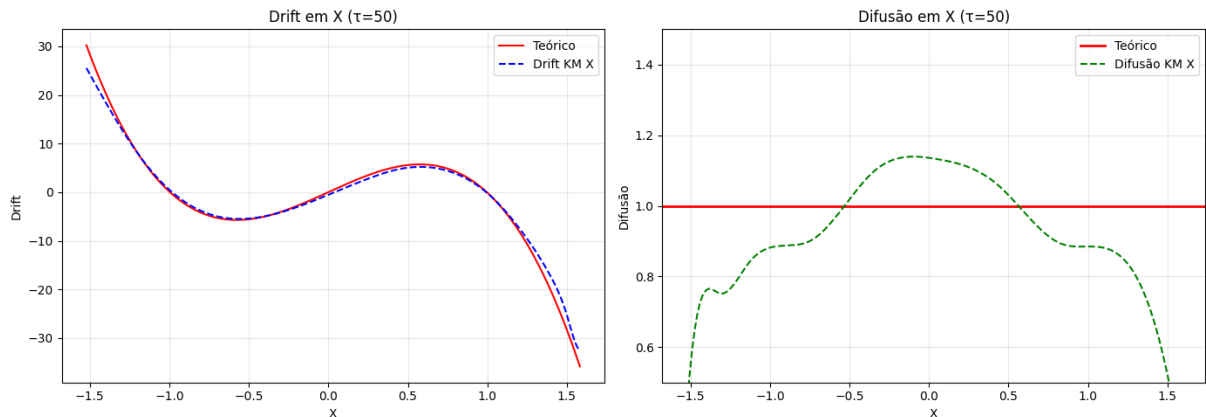
Fonte: Próprio autor.

Figura 22 – Comparação entre os coeficientes de drift (à esquerda) e difusão (à direita) ao longo de  $z$ , obtidos via inferência de Kramers-Moyal com  $\tau = 10$  (1ms em tempo físico).



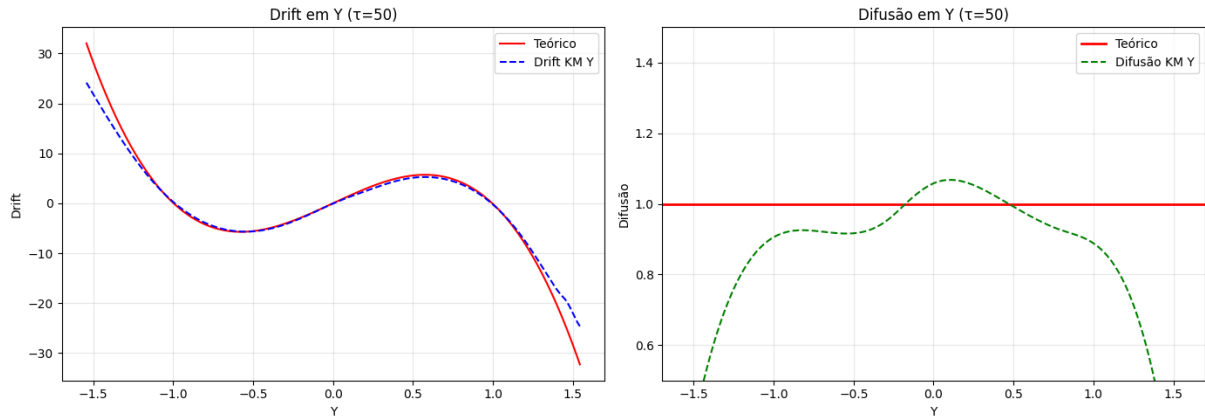
Fonte: Próprio autor.

Figura 23 – Comparação entre os coeficientes de drift (à esquerda) e difusão (à direita) ao longo de  $x$ , obtidos via inferência de Kramers-Moyal com  $\tau = 50$  (5ms em tempo físico).



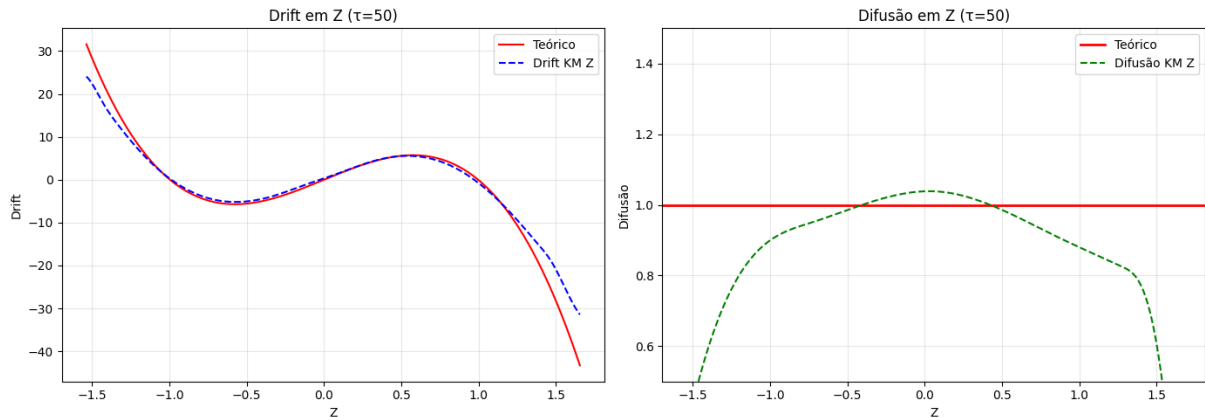
Fonte: Próprio autor.

Figura 24 – Comparação entre os coeficientes de drift (à esquerda) e difusão (à direita) ao longo de  $y$ , obtidos via inferência de Kramers-Moyal com  $\tau = 50$  (5ms em tempo físico).



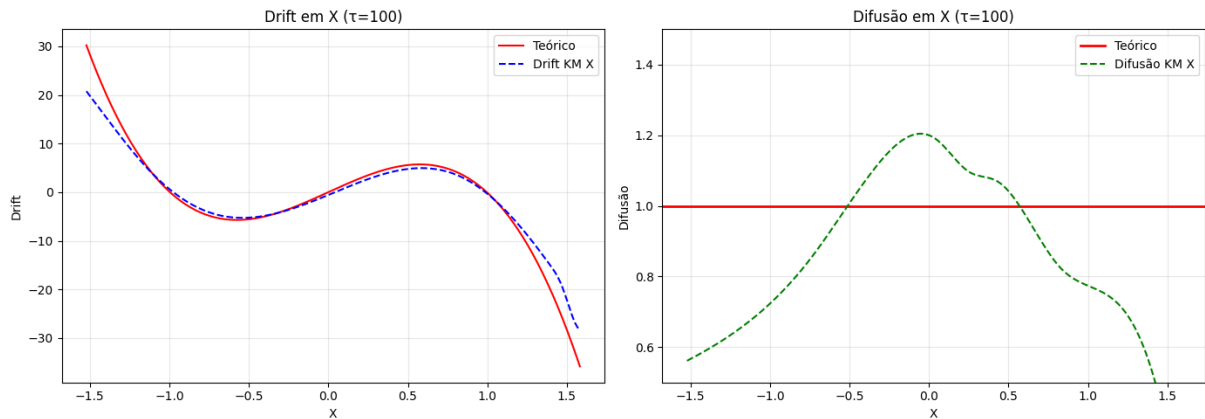
Fonte: Próprio autor.

Figura 25 – Comparação entre os coeficientes de drift (à esquerda) e difusão (à direita) ao longo de  $z$ , obtidos via inferência de Kramers-Moyal com  $\tau = 50$  (5ms em tempo físico).



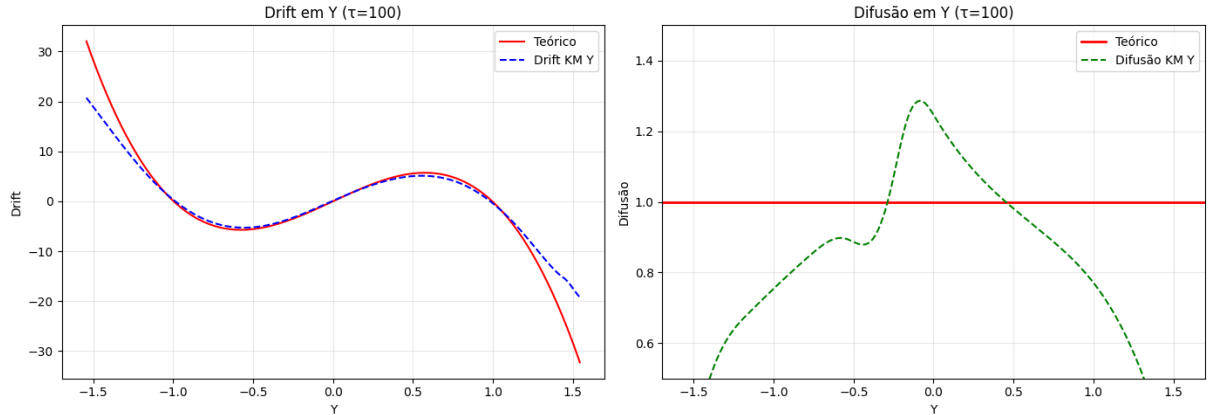
Fonte: Próprio autor.

Figura 26 – Comparação entre os coeficientes de drift (à esquerda) e difusão (à direita) ao longo de  $x$ , obtidos via inferência de Kramers-Moyal com  $\tau = 100$  (10ms em tempo físico).



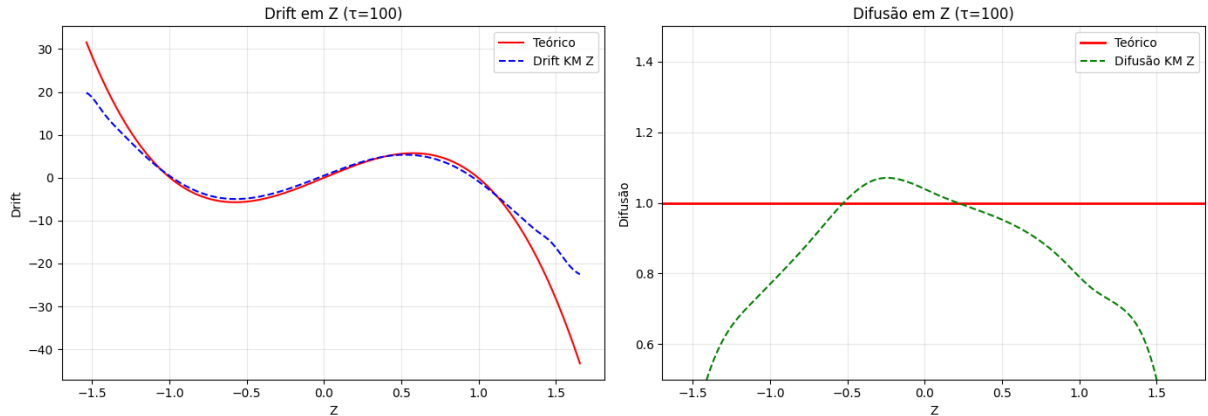
Fonte: Próprio autor.

Figura 27 – Comparação entre os coeficientes de drift (à esquerda) e difusão (à direita) ao longo de  $x$ , obtidos via inferência de Kramers-Moyal com  $\tau = 100$  (10ms em tempo físico).



Fonte: Próprio autor.

Figura 28 – Comparação entre os coeficientes de drift (à esquerda) e difusão (à direita) ao longo de  $x$ , obtidos via inferência de Kramers-Moyal com  $\tau = 100$  (10ms em tempo físico).



Fonte: Próprio autor.

Uma limitação notável da abordagem de Kramers-Moyal está na dependência estatística da amostragem: regiões do espaço com baixa visitação possuem variância elevada nas estimativas, prejudicando a reconstrução do campo de forças. Técnicas como suavização com “splines” ou filtros gaussianos foram necessárias para tornar os campos inferidos analisáveis.

#### 4.1.1 Comportamento com $\tau$ Pequeno

Quando  $\tau$  é pequeno, as aproximações de Taylor e a suposição de que a dinâmica é local (dependente apenas do ponto atual  $x$ ) são válidas. Dessa forma, os coeficientes inferidos refletem com precisão os valores reais de drift e difusão.

#### 4.1.2 *Comportamento com $\tau$ Grande*

À medida que o valor de  $\tau$  aumenta, diversos problemas surgem, como a não localidade da dinâmica, pois para valores maiores de  $\tau$ , a partícula pode se mover significativamente durante o intervalo, de forma que  $\Delta x$  depende não apenas da posição inicial  $x$ , mas de todo o caminho percorrido. Isso viola a premissa da inferência local.

Outro problema que pode ocorrer é que com grandes intervalos de tempo, os deslocamentos acumulam contribuições de regiões distintas do espaço de fases, onde as forças determinísticas (drift) e ruídos (difusão) variam. Assim, o resultado inferido é uma média globalizada, distorcendo a estimativa pontual.

Para  $\tau$  grandes, menos pares de pontos contribuem para as estatísticas, já que se exige um maior intervalo de tempo entre as amostras. Isso reduz o número de amostras disponíveis e aumenta a variância estatística nas estimativas.

Assim valores muito grandes de  $\tau$  levam a estimativas de drift e difusão menos precisas e mais distantes dos valores reais. Idealmente,  $\tau$  deve ser pequeno o suficiente para garantir a validade das aproximações locais da expansão de Kramers-Moyal, mas grande o bastante para superar o ruído numérico, um equilíbrio que depende da escala da dinâmica, do tempo de amostragem e da quantidade de dados disponíveis.

## 5 CONCLUSÕES SOBRE O TRABALHO

Neste trabalho, realizamos a inferência dos coeficientes de drift e difusão a partir de trajetórias simuladas de partículas sujeitas a dinâmica estocástica governada pela equação de Langevin. Utilizamos o método de Kramers-Moyal e implementamos uma análise sistemática variando o parâmetro  $\tau$ , o qual representa o intervalo de tempo entre os pontos considerados para a estimação das derivadas temporais. Nossos resultados foram comparados com os coeficientes teóricos conhecidos do sistema.

Observamos que, para valores pequenos de  $\tau$ , a estimativa do drift e da difusão se aproximam bem da solução analítica. À medida que  $\tau$  aumenta, a difusão e o drift estimados apresentam maior variação e se distanciam qualitativamente da constante real. Esse comportamento está de acordo com o que foi discutido em (Callaham *et al.*, 2021), no qual os autores destacam que o intervalo de tempo entre observações deve ser adequado para capturar a estrutura estatística do sistema, mas não tão grande a ponto de invalidar a aproximação de Itô.

Além disso, nossos resultados mostram a limitação dos métodos baseados em diferenças finitas para inferência direta a partir de dados ruidosos. A escolha de  $\tau$  é crítica e deve ser balanceada para minimizar erros sistemáticos e estatísticos. Além da comparação com os coeficientes analíticos, utilizamos histogramas espaciais e a solução estacionária da equação de Fokker-Planck para validar a distribuição de probabilidade das trajetórias. A boa concordância entre os histogramas simulados e a distribuição teórica reforça a consistência das simulações e da metodologia de inferência adotada.

A localização dos picos de ocupação nas regiões de mínimo do potencial duplo evidencia a influência dominante do termo determinístico da equação de Langevin (drift), enquanto a dispersão em torno desses pontos reflete a ação do ruído térmico.

Foi completamente satisfatória, em comparação com os valores esperados, a “reconstrução” de um sistema caracterizado pelo Movimento Browniano a partir da equação de Langevin, sendo possível inferir os principais termos que regem a equação, bem como visualizar com detalhes o comportamento de uma partícula submetida a um potencial.

## REFERÊNCIAS

- ALVES, R.; DELGADO, C. **Processos estocásticos**. Portugal: Faculdade de Economia, Universidade do Porto, 1997. Disponível em: <https://repositorio-aberto.up.pt/handle/10216/71434>. Acesso em: 25 abr. 2025.
- AMAR, S. *et al.* Determinants of job seekers' decision for migration; a study in big cities in indonesia. **Webology**, v. 17, n. 2, 2020.
- ATUNCAR, G. S. **Conceitos básicos de processos estocásticos**. Belo Horizonte: UFMG, 2011.
- BERNOULLI, D. **Hydrodynamica, sive, De viribus et motibus fluidorum commentarii**. [S. l.]: Sumptibus Johannis Reinholdi Dulseckeri, typis Joh. Henr. Deckeri ..., 1738.
- BLUNDELL, S. J.; BLUNDELL, K. M. **Concepts in thermal physics**. [S. l.]: Oup Oxford, 2010.
- CALLAHAM, J. L.; LOISEAU, J.-C.; RIGAS, G.; BRUNTON, S. L. Nonlinear stochastic modelling with langevin regression. **Proceedings of the Royal Society A**, The Royal Society Publishing, v. 477, n. 2250, p. 20210092, 2021.
- CLAUSIUS, R. J. E. **Ueber die Art der Bewegung, welche wir Wärme nennen**. [S. l.]: Verlag nicht ermittelbar, 1857.
- EINSTEIN, A. *et al.* On the motion of small particles suspended in liquids at rest required by the molecular-kinetic theory of heat. **Annalen der physik**, v. 17, n. 549-560, p. 208, 1905.
- FOKKER, A. D. Die mittlere energie rotierender elektrischer dipole im strahlungsfeld. **Annalen der Physik**, WILEY-VCH Verlag Leipzig, v. 348, n. 5, p. 810–820, 1914.
- GORDON, H. S. A survey of contemporary economics. vol. 1. edited by howard s. ellis. philadelphia, pa. and toronto: The blakiston company, for the american economic association. 1948. pp. viii, 490. vol. ii. edited by bernard f. haley. homewood, ill.: Richard d. irwin, inc., for the american economic association. 1952. pp. xvi, 474. **Canadian Journal of Economics and Political Science/Revue canadienne de economiques et science politique**, Cambridge University Press, v. 20, n. 1, p. 131–134, 1954.
- GORJÃO, L. R.; MEIRINHOS, F. kramersmoyal: Kramers–moyal coefficients for stochastic processes. **arXiv preprint arXiv:1912.09737**, 2019.
- HARRIS, J. R.; TODARO, M. P. Migration, unemployment and development: a two-sector analysis. **The American economic review**, JSTOR, v. 60, n. 1, p. 126–142, 1970.
- HONISCH, C.; FRIEDRICH, R. Estimation of kramers-moyal coefficients at low sampling rates. **Physical Review E—Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics**, APS, v. 83, n. 6, p. 066701, 2011.
- IOSIFESCU, M. **Finite Markov processes and their applications**. [S. l.]: Courier Corporation, 2014.

KAHEMAN, K.; KUTZ, J. N.; BRUNTON, S. L. Sindy-pi: a robust algorithm for parallel implicit sparse identification of nonlinear dynamics. **Proceedings of the Royal Society A**, The Royal Society Publishing, v. 476, n. 2242, p. 20200279, 2020.

KARUSH, J. On the chapman-kolmogorov equation. **The Annals of Mathematical Statistics**, JSTOR, v. 32, n. 4, p. 1333–1337, 1961.

KHAN, A. S. **The nature and magnitude of global non-fuel fisheries subsidies**. Tese (Doutorado) – University of British Columbia, 2006.

LANGEVIN, P. *et al.* Sur la théorie du mouvement brownien. **CR Acad. Sci. Paris**, v. 146, n. 530-533, p. 530, 1908.

MAO, X. The truncated euler–maruyama method for stochastic differential equations. **Journal of Computational and Applied Mathematics**, Elsevier, v. 290, p. 370–384, 2015.

MAXWELL, J. C. Iv. on the dynamical theory of gases. **Philosophical transactions of the Royal Society of London**, The Royal Society London, n. 157, p. 49–88, 1867.

NEWBURGH, R.; PEIDLE, J.; RUECKNER, W. 1. r. brown, edinb. phil. j. 5, 358 (1828); philos. mag. 4, 161 (1828); see also a. fick, poggendorff's annalen 94, 59 (1855), and (in english) philos. mag. s. 4, 10, 30–39 (1855). 2. r. kohlrausch, theorie des elektrischen rückstandes in der leidener flasche; von r. kohlrausch, pogg. ann. phys. chem. 91, 179–214 (1854). for experimental data. In: **Proc. Camb. Philos. Soc.** [*S. l.: s. n.*], 1851. v. 9, p. 8–106.

PLANCK, V. Über einen satz der statistischen dynamik und seine erweiterung in der quantentheorie. **Sitzungsberichte der**, 1917.

RICCIARDI, L. M. On the transformation of diffusion processes into the wiener process. **Journal of Mathematical Analysis and Applications**, Elsevier, v. 54, n. 1, p. 185–199, 1976.

SALINAS, S. R. **Introdução à física estatística**. [*S. l.*]: Edusp, 1999.

SATO, I.; NAKAGAWA, H. Approximation analysis of stochastic gradient langevin dynamics by using fokker-planck equation and ito process. In: PMLR. **International Conference on Machine Learning**. [*S. l.*], 2014. p. 982–990.

SCHAEFER, M. B. Some considerations of population dynamics and economics in relation to the management of the commercial marine fisheries. **Journal of the Fisheries Board of Canada**, NRC Research Press Ottawa, Canada, v. 14, n. 5, p. 669–681, 1957.

SEKIMOTO, K. Langevin equation and thermodynamics. **Progress of Theoretical Physics Supplement**, Oxford Academic, v. 130, p. 17–27, 1998.

SHARMA, S. N.; PATEL, H. G. The fokker-planck equation. In: **Stochastic Control**. [*S. l.*]: IntechOpen Rijeka, 2010. p. 1–20.

SHI, J.; CHEN, T.; YUAN, R.; YUAN, B.; AO, P. Relation of a new interpretation of stochastic differential equations to ito process. **Journal of Statistical physics**, Springer, v. 148, p. 579–590, 2012.

SILVA, B. M. de; CHAMPION, K.; QUADE, M.; LOISEAU, J.-C.; KUTZ, J. N.; BRUNTON, S. L. Pysindy: a python package for the sparse identification of nonlinear dynamics from data. **arXiv preprint arXiv:2004.08424**, 2020.

SILVA, F. C. Á. da. Simulação e análise numérica de equações diferenciais estocásticas unidimensionais: uma abordagem introdutória. Universidade Federal de Minas Gerais, 2013.

SILVA, I. D. **TCC\_Inferencia**. Zenodo, 2025. Disponível em: <https://doi.org/10.5281/zenodo.15839270>.

TOMÉ, T. **Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade Vol. 35**. [S. l.]: Edusp, 2001.



## APÊNDICE A – ALGORITMO UTILIZADO

Figura 29 – Parâmetros de simulação e definição do potencial tridimensional utilizados para gerar trajetórias de partículas em um sistema estocástico. Inclui a definição dos limites espaciais, constantes físicas, e a formulação matemática do potencial e da força associada.

```
# Geração aleatória de números
rng = np.random.default_rng()

# Parâmetros de simulação
dt = 1e-6 # Passo de tempo para simulação
dt_out = 1e-4 # Passo de tempo para trajetórias salvas
stride_out = int(np.round(dt_out / dt))
N_sim = 20 # Número de trajetórias a serem geradas

# Número de passos de tempo para cada trajetória
traj_duracao_segundos = 5.0 # duração total da simulação por partícula (em segundos)
N_steps = int(traj_duracao_segundos / dt) # total de passos por trajetória

# Aplica mesmo comprimento para todas as partículas
N_steps = np.full(N_sim, N_steps, dtype=int)
# Limites das condições iniciais
x_L, y_L = -1.5, -1.5
x_R, y_R = 1.5, 1.5
z_L, z_R = -1.5, 1.5

D = 1.0 # Constante de difusão
U0 = 2.0
kBT = 1.0 # Energia térmica
alpha = 15.0
beta = 15.0
gamma = 0.1 # Termo de amortecimento

def potential(x, y, z):
    return -alpha/2 * (x**2 + y**2 + z**2) + beta/4 * (x**4 + y**4 + z**4)

def a(x, y, z):
    return np.array([
        alpha*x - beta*x**3 - gamma*x,
        alpha*y - beta*y**3 - gamma*y,
        alpha*z - beta*z**3 - gamma*z
    ])
```

Fonte: Próprio autor.

Figura 30 – Implementação do algoritmo de Euler-Maruyama para a simulação de trajetórias estocásticas de partículas. O código define as condições iniciais, gera o ruído térmico e atualiza a posição das partículas ao longo do tempo.

```
trajectories = []
print("{time}\tRodando simulação de {total} trajetórias...".format(
    total=N_sim,
    time=datetime.datetime.now().strftime('%Y-%m-%d %H:%M:%S')))
for i in range(N_sim):
    print("{time}\tExecutando simulação {cur_int} de {total}...".format(
        cur_int=i + 1,
        total=N_sim,
        time=datetime.datetime.now().strftime('%Y-%m-%d %H:%M:%S')),
        end='\n'
    )

    # Gerar array com trajetória atual (3D)
    current_trajectory = np.zeros((N_steps[i] + 1, 3), dtype=float)
    # Condição inicial para a trajetória atual
    current_trajectory[0, 0] = rng.random() * (x_R - x_L) + x_L
    current_trajectory[0, 1] = rng.random() * (y_R - y_L) + y_L
    current_trajectory[0, 2] = rng.random() * (z_R - z_L) + z_L

    # Gerar todos os números aleatórios para a simulação atual
    random_numbers_for_current_simulation = rng.normal(size=(N_steps[i], 3))
    random_numbers_for_current_simulation *= np.sqrt(2 * D * dt)

    # Algoritmo Euler-Maruyama
    for j in range(N_steps[i]):
        drift = a(current_trajectory[j, 0], current_trajectory[j, 1], current_trajectory[j, 2])
        current_trajectory[j + 1] = current_trajectory[j] + dt * drift + random_numbers_for_current_simulation[j]
```

Fonte: Próprio autor.

Figura 31 – Implementação da função de inferência baseada em regressão esparsa com atraso temporal  $\tau$  para estimativa do drift e da difusão. Utiliza o modelo SINDy com biblioteca polinomial para identificar as equações dinâmicas a partir das trajetórias simuladas.

```
def run_inference(self, tau=1, threshold=0.1):
    """
    Executa a inferência usando regressão esparsa com um atraso temporal tau.

    Parâmetros:
        tau (int): número de passos de tempo entre as amostras usadas na derivada.
        threshold (float): limiar de esparsidade para STLSQ.

    Retorna:
        dict: resultados contendo posições médias, drift estimado e difusão estimada.
    """

    # Concatenar todas as trajetórias
    X_all = []
    X_dot_all = []
    for traj in self.trajectories:
        if len(traj) > tau:
            X_all.append(traj[:-tau])
            X_dot_all.append((traj[tau:] - traj[:-tau]) / (tau * self.dt_out))

    X = np.vstack(X_all)
    X_dot = np.vstack(X_dot_all)

    # Criar e ajustar o modelo SINDy
    library = PolynomialLibrary(degree=5, include_interaction=True)
    self.model = SINDy(
        optimizer=STLSQ(threshold=threshold),
        feature_library=library,
        feature_names=['x', 'y', 'z']
    )
    self.model.fit(X, X_dot=X_dot)

    # Estimar o drift
    drift_pred = self.model.predict(X)

    # Organizar resultados por bins ao longo de x
    N_bins = self.N_bins
    a = np.zeros((N_bins, 3))
    D = np.zeros((N_bins, 3))
    bin_centers = np.zeros((N_bins, 3))

    for dim in range(3): # Para x, y, z
        vals = X[:, dim]
        bins = np.linspace(np.min(vals), np.max(vals), N_bins + 1)
        centers = (bins[:-1] + bins[1:]) / 2
        bin_centers[:, dim] = centers

        for i in range(N_bins):
            mask = (vals >= bins[i]) & (vals < bins[i+1])
            if np.any(mask):
                a[i, dim] = np.mean(drift_pred[mask, dim])
                D[i, dim] = 0.5 * np.var(X_dot[mask, dim]) * tau * self.dt_out
            else:
                a[i, dim] = np.nan
                D[i, dim] = np.nan

    return {'x': bin_centers, 'a': a, 'D': D}
```

Fonte: Próprio autor.

Figura 32 – Implementação do método de Kramers–Moyal para estimar localmente os coeficientes de difusão e drift a partir dos deslocamentos de partículas agrupadas em bins espaciais. A função calcula médias e variâncias dos deslocamentos com atraso temporal fixo  $\tau$ .

```
def kramers_moyal(self, bin_index, tau):
    ix, iy, iz = bin_index
    mask = (self.traj_bin_indices[:, 2] == ix) & (self.traj_bin_indices[:, 3] == iy) & (self.traj_bin_indices[:, 4] == iz)
    list_of_trajectories_starting_in_bin = self.traj_bin_indices[mask]
    N = len(list_of_trajectories_starting_in_bin)
    # configurar variáveis para <x>, <x^2>, que queremos estimar a partir dos dados
    delta_x = np.zeros(3) # Para armazenar deslocamentos em 3D
    delta_x_squared = np.zeros(3)

    for i, cur_index in enumerate(list_of_trajectories_starting_in_bin):
        if cur_index >= len(self.traj_index) or cur_index >= len(self.traj_number):
            print(f"Index {cur_index} is out of bounds for 'traj_index' or 'traj_number'.")
            continue

        traj_num = self.traj_number[cur_index]
        if traj_num >= len(self.trajectory_lengths):
            print(f"trajectory number {traj_num} is out of bounds.")
            continue

        if (self.traj_index[cur_index] + tau) >= self.trajectory_lengths[traj_num]:
            N -= 1
            continue

        cur_diff = self.trajectories[self.traj_number[cur_index]] \
            [self.traj_index[cur_index]+tau] \
            - self.trajectories[self.traj_number[cur_index]] \
            [self.traj_index[cur_index]]

        #
        delta_x += cur_diff
        delta_x_squared += cur_diff**2
        #
    if N == 0:
        return np.nan, np.nan
    #
    D = delta_x_squared / (2*N*self.dt*tau)
    drift = delta_x / (N*self.dt*tau)
    #
    return D, drift
```

Fonte: Próprio autor.

Figura 33 – Geração de gráficos comparando os resultados inferidos de drift e difusão com os valores teóricos ao longo das três dimensões espaciais (x, y, z), para diferentes valores de  $\tau$ .

```
tau_values = [1, 5, 10, 50, 100]
alpha, beta, gamma = 15.0, 15.0, 0.1

# Loop para diferentes  $\tau$ 
for  $\tau$  in tau_values:
    print(f"\nInferindo com  $\tau = \{\tau\}$ ")
    res = infer.run_inference(tau= $\tau$ )

    for dim_index, dim_name in enumerate(['X', 'Y', 'Z']):
        # Seleciona os resultados da dimensão atual
        x_vals = res['x'][:, dim_index]
        a_vals = res['a'][:, dim_index]
        D_vals = res['D'][:, dim_index]

        # Suaviza resultados
        a_s = gaussian_filter1d(a_vals, sigma=1)
        D_s = gaussian_filter1d(D_vals, sigma=1)

        # Spline para suavização visual
        spline_a = UnivariateSpline(x_vals, a_s, s=0.5)
        spline_D = UnivariateSpline(x_vals, D_s, s=0.5)
        x_range = np.linspace(x_vals.min(), x_vals.max(), 200)

        # Cria gráfico de drift e difusão para cada eixo
        fig, (ax1, ax2) = plt.subplots(1, 2, figsize=(14, 5))

        # Drift
        drift_teorico = (alpha - gamma) * x_range - beta * x_range ** 3
        ax1.plot(x_range, drift_teorico, 'r-', label='Teórico')
        ax1.plot(x_range, spline_a(x_range), 'b--', label=f'Drift KM {dim_name}')
        ax1.set(title=f'Drift em {dim_name} ( $\tau=\{\tau\}$ )', xlabel=dim_name, ylabel='Drift')
        ax1.legend(); ax1.grid(alpha=0.3)

        # Difusão
        ax2.axhline(1.0, color='r', lw=2, label='Teórico')
        ax2.plot(x_range, spline_D(x_range), 'g--', label=f'Difusão KM {dim_name}')
        ax2.set(title=f'Difusão em {dim_name} ( $\tau=\{\tau\}$ )', xlabel=dim_name, ylabel='Difusão')
        ax2.set_ylim(0.5, 1.5)
        ax2.legend(); ax2.grid(alpha=0.3)

    plt.tight_layout()
    plt.show()
```

Fonte: Próprio autor.